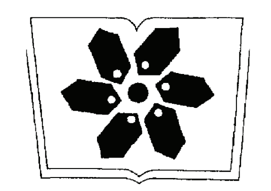
现代物理基础丛书 37

量子物理新进展

梁九卿　韦联福　著





中国科学院科学出版基金资助出版

《现代物理基础丛书》编委会

现代物理基础丛书　37

量子物理新进展

梁九卿　韦联福　著

科学出版社
北　京

内 容 简 介

本书第 1 章介绍规范变换、正则量子化和经典量子对应。第 2~4 章从规范场的观点统一论述 Aharonov-Bohm 效应，自旋–轨道耦合动力学，Berry 相因子及其应用；揭示 Dirac 磁单极，超导体 Josephson 效应和量子态拓扑相因子的关系；Aharonov-Casher 相位则成为非 Abel 规范场量子力学模型的一个特例。第 5~6 章介绍路径积分，量子隧穿的瞬子方法及在分子磁体宏观量子效应中的应用；超对称量子力学，孤子(瞬子)稳定性及涨落方程。第 7 章阐述绝热逻辑门量子计算方案，帮助读者理解 Shor 量子算法的基本思想及其运行过程。第 8 章介绍用超导电路的量子调控验证量子非局域关联的方法。

本书适用于物理等相关专业的研究人员、教师、研究生和本科高年级学生。

图书在版编目(CIP)数据

量子物理新进展/梁九卿，韦联福著. —北京：科学出版社，2011
(现代物理基础丛书；37)
ISBN 978-7-03-032205-0
Ⅰ.①量… Ⅱ.①梁… ②韦… Ⅲ.①量子论–高等学校–教材 Ⅳ.①O413
中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011) 第 175309 号

责任编辑：刘凤娟／责任校对：张凤琴
责任印制：钱玉芬／封面设计：陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

中国科学院印刷厂 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2011 年 8 月第 一 版 开本：B5(720×1000)
2011 年 8 月第一次印刷 印张：13 1/2
印数：1—2 000 字数：245 000

定价：49.00 元
(如有印装质量问题，我社负责调换)

前 言

从 1999 年开始, 梁九卿教授就在山西大学给物理国家基地班本科四年级和研究生讲授“量子物理新进展”和“凝聚态场论方法”两门课程。开设此课程的初衷是帮助学生由课堂学习向研究工作过渡，因为从教科书学习到阅读文献进入研究课题，学生的知识和能力一般都会存在一个断档，常常要有一段较长时间的摸索和训练过程。书稿的前六章基本上是根据这些年授课的讲义整理而成，后两章则基于西南交通大学韦联福教授的研究。本书的写作深受张礼和葛墨林两位先生合著的《量子力学的前沿问题》(清华大学出版社) 的启迪，该书全面地介绍了近年来量子力学的研究进展，是对研究人员和高校师生都十分有用的参考书。

量子力学是支配物质世界运动和变化规律的基本法则，而描述宏观现象的经典力学一般来说只是量子力学在宏观尺度下的近似。通常宏观系统的量子效应并不显著，但在特定的系统中量子现象也可在宏观尺度下表现出来，称为宏观量子效应。例如，超导体中的 Josephson 隧穿、液氦中的超流动性，以及 Bose-Einstein 凝聚等都是众所周知的宏观量子效应例子。随着半导体微电子技术和测量技术的发展，磁性材料的制备和研究已进入纳米尺度。低温下纳米磁体已表现出明显的量子特性，纳米磁体磁化矢量的隧穿就是一种宏观量子现象，它的研究可直接影响磁存储技术和量子计算。

Aharonov-Bohm 效应被认为是量子力学特有的现象，通常只在量子力学框架内讨论和介绍。本书则从经典力学正则方程出发揭示出量子与经典之间的一一对应，指出存在动力学和拓扑两类效应。Aharonov-Bohm 效应、Dirac 磁单极和超导体 Josephson 效应看起来互不相关，其实它们有共同的物理本质，即拓扑量子相位。本书把三者放在同一章中，作为拓扑相因子的应用实例来讨论，从而揭示出它们之间的内在联系。自旋和自旋–轨道耦合的动力学研究不仅有助于正确理解中子干涉实验和 Aharonov-Casher 效应，而且还提供了一个非 Abel 规范场量子力学模型。此外，书中还给出了半导体中自旋–轨道耦合的基本公式，是理解介观系统自旋极化输运模型的有用知识。

量子隧穿周期瞬子方法在凝聚态、高能物理和量子引力中有广泛的应用，本书在路径积分的基础上详细介绍了这一方法及其在分子磁体宏观量子效应研究中的应用。孤子 (瞬子) 解的小振动模是为了研究经典解的稳定性和路径积分的微扰计算而引入的，把它们纳入超对称量子力学框架，使其形成一个精确可解势模型家族，从而提供了一个构造一维 Schrödinger 方程新解的系统方法。

量子计算是最近十多年来物理学和信息科学共同关注的热点研究领域，其主要动力来自于著名的 Shor 大数因子分解算法的提出。虽然国内从事量子信息科学研究的学者很多，但直接在量子算法的构造和理解等方面开展的工作却相对较少。通过本书第 7 章的实例，读者将能更具体地理解 Shor 量子算法的基本思想及其运行过程的概貌。另外，绝热逻辑门量子计算方案的提出为量子计算的物理实现提供了另一个可供选择的途径。

从量子力学诞生之日起，伴随着它的基本原理及解释的争论一直都没有中断过。量子力学作为一种成功的理论，已经被广泛地应用到了各个学科领域，也催生了各种新技术的发展和应用，然而其基本原理的实验检验仍是极具挑战性的研究课题。例如，关于量子理论本身的完备性以及非定域性关联问题，虽然已经在很多微观系统中 (如光子、中子及囚禁离子等) 得到了证实，但在宏观尺度上的实验例子还不多。鉴于超导电子学系统中宏观量子相干效应已经被实验证实，利用超导电路的量子调控来实现量子非局域关联的验证就有了现实意义。

值得指出的是，量子物理已成为近代科学的基础，其研究工作不仅有重要的基础理论意义，而且直接影响到相关新技术的发展。例如，物质波干涉和基于 Josephson 效应的宏观量子调控等都已发展成相应的技术。因此，本书的某些研究专题与当今及未来的量子技术发展有着密切联系。

本书的题材全选自作者自己做过的研究课题，并且对每个专题都进行了较深入的讨论，因此兼有研究专著的性质。全书的内容主要由七个相对独立但又彼此关联的专题组成，基本反映了作者多年来从事量子物理研究的历程和心得。每个专题都力求从原始模型的建立开始，自成体系，既方便读者选取自己感兴趣的题目阅读，也可单独用作研究生或本科生的教材。前五个专题主要论述量子态几何相因子和宏观量子效应，由梁九卿教授执笔; 后两个专题涉及量子算法，宏观量子计算和量子力学基本原理的验证等，由韦联福教授撰写。

书中前 6 章的插图是由山西大学理论物理研究所的在读博士生常博和连进铃完成的，西南交通大学量子光电实验室的研究生们也为本书的部分文字录入工作提供了帮助，在此一并感谢。

作者还要特别感谢他们的合作者在各专题研究中所给予的帮助。

由于各个课题本身仍是不断发展的前沿问题，内容在不断更新和发展，书中难免有疏漏及不妥之处，恳请读者批评指正。

作　者

目　　录

第 1 章　规范变换，正则量子化和经典量子对应

本章是基础知识的简要回顾和总结, 旨在用最简单的系统 (一个自由度的点粒子和真空中的自由电磁场) 为例来阐述经典动力学和量子力学的正则化公理体系和一些重要的基本概念，如规范变换、经典–量子对应等。文献中经典–量子对应大多只讨论在大量子数极限下 (或者 $\hbar \to 0$) 量子力学趋于经典理论。其实, 在相干态 (包括自旋相干态) 中, 力学量期待值的时间演化和经典动力学方程完全一致, 这种意义下的经典–量子对应在宏观量子效应中起更为重要的作用。Aharonov-Bohm 和 Berry 相位、磁单极和任意子的讨论必然涉及拓扑流形和微分几何，为方便读者阅读, 我们以 $U(1)$ 规范场为例给出了微分形式和外微分的基本公式。

1.1　物质世界的经典图像及质点动力学

物理学研究物质世界的演变规律及其所以如此演化的道理。有物质有道理，即所谓物理。物理学试图穷究一切事物的道理，没有固定的研究对象，物质系统有广泛的含义，例如, 它也可以是社会系统。物理学研究的系统都有可供实验测量的量，称为物理观察量，它们一般是空间坐标和时间的函数，泛称为场变量。在这种广义的场变量概念下一切物理量都可称为场变量。例如，点粒子的坐标 $\boldsymbol{r}(t)$ 只是时间的函数，空间缩为一几何点，是零维的，称为 $0+1$ 维矢量场；电场强度 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ 是 $3+1$ 维矢量场。描述各种系统的不同物理量，也可能是旋量、张量场等。运动定律描述物理观察量之间关系和演化的规律性，并用数学公式表示, 是系统的本质属性，原则上它应当被实验检测, 而且, 实验可无限重复。当然，运动定律常常是理想条件下的规律, 它们的建立包含了合理的简化和逻辑推理。物理学的任务不仅是发现并总结出系统的运动和变化规律，而且要抽象上升到和具体系统无关的原理，原理具有普适性，即所谓的道理。例如，点粒子运动遵从 Newton 定律，而电磁场满足 Maxwell 方程等，它们都是运动规律, 都可统一到 Hamilton 原理，或者最小作用量原理中。物理其实是以数学为手段，研究任何未知事物存在和演化道理的方法，物理学的方法可用到有固定研究对象的学科中，如化学物理、生物物理等。

1.1.1　质点运动方程和最小作用量原理

我们用一个最简单的系统，即单个粒子在一维空间中的运动为例，来解释其运动规律并揭示产生这种规律的道理。这一简单系统的物理观察量是 $q(t)(0+1$

维实标量场), 如它可以是粒子空间运动的坐标 —— 广义坐标, 相应的广义速度是 $\dot{q}(t)=\dfrac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}$。质点运动规律由 Newton 方程描述，它是实验观测的总结，人们可以认识和发现规律但不能创造规律。我们假定粒子在一保守力场中运动，即存在一个相应的不显含时间的势函数 $V(q)$，则物理观测量 $q(t)$ 时间演化遵从的运动方程是

$$m\ddot{q}=-\frac{\partial V(q)}{\partial q} \tag{1.1.1}$$

由于势函数不显含时间，运动方程满足时间平移不变，积分一次后变为

$$\frac{1}{2}m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\dot{q})^2=-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} \tag{1.1.2}$$

由此得到一个守恒量 —— 机械能，记为 E，积分一次后的运动方程则是

$$E=\frac{1}{2}m\dot{q}^2+V \tag{1.1.3}$$

守恒量总是对应于运动规律的某种时空变化对称性，特别是当 $V(q)=0$ 时，方程 (1.1.1) 还具有空间平移不变性，由此又导致动量守恒

$$m\dot{q}=p$$

动量 p 是常数。物理学并不满足于仅给出系统的运动方程，这里一个要回答的问题是，得出 Newton 方程的道理或者原理是什么？这一原理应具有普遍性，不依赖系统的具体特性。我们用上述的简单系统给出力学原理的引导，为此，定义一个 Lagrange 函数 (以下简称拉氏量)

$$L(q,\dot{q})=\frac{1}{2}m\dot{q}^2-V(q) \tag{1.1.4}$$

它是组态空间的函数，对这一简单系统来说，就是动能减势能。再定义一称为作用量的泛函

$$S=\int_{q(t_{\mathrm{i}})}^{q(t_{\mathrm{f}})}L(q,\dot{q})\mathrm{d}t \tag{1.1.5}$$

作用量依赖于拉氏量。对于固定的空间两点 $q(t_{\mathrm{i}})$ 和 $q(t_{\mathrm{f}})$, 经典粒子总是走使作用量最小的路径，称为最小作用量原理或者 Hamilton 原理。对 S 变分取极值，可得

$$\delta S=\int_{t_{\mathrm{i}}}^{t_{\mathrm{f}}}\left(\frac{\partial L}{\partial q}\delta q+\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\delta\dot{q}\right)\mathrm{d}t=\int_{t_{\mathrm{i}}}^{t_{\mathrm{f}}}\left(\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}\right)\delta q\mathrm{d}t=0 \tag{1.1.6}$$

第二等式中用了分部积分，并注意到固定端点的变分为零。由于 δq 是任意路径变分 (图 1.1.1)，所以

$$\frac{\partial L}{\partial q}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}=0 \tag{1.1.7}$$

即 Lagrange 方程 (以下简称拉氏方程)。

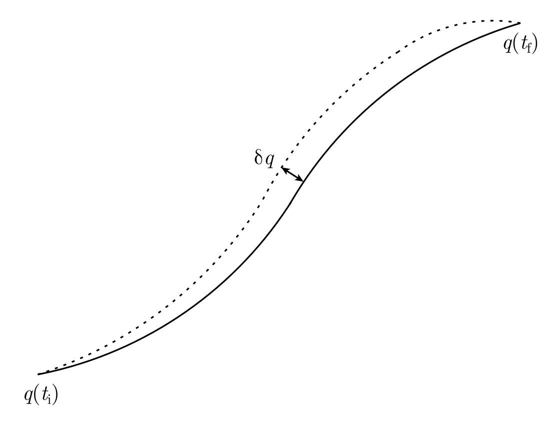


图 1.1.1 固定端点的路径变分

例如，一维谐振子的拉氏量是

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \tag{1.1.8}$$

代入上面的拉氏方程，就得到熟悉的谐振子运动方程

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0 \tag{1.1.9}$$

我们用点粒子解释了力学原理的引导，其实，该原理具有普适意义，从最小作用量原理出发，各种物理系统的时间演化规律都可以从同一原理演绎得到。例如，电磁场的场变量运动规律由 Maxwell 方程描述，它遵从同样的最小作用量原理。

1.1.2 规范变换

规范变换 (gauge transformation) 是描述基本粒子间相互作用的规范场理论中的一个重要概念，它其实有更广泛的意义。对于给定系统的运动方程 (实验规律), 拉氏函数 L 并不是唯一的, 我们可以加任意一个时空函数 $f(q,t)$ 的全导数。新的拉氏函数为

$$L' = L + \frac{\mathrm{d}f(q,t)}{\mathrm{d}t} = L + \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{q}\frac{\partial f}{\partial q} \tag{1.1.10}$$

从它导出的拉氏方程为

$$\frac{\partial L'}{\partial q} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L'}{\partial \dot{q}}\right) = \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) = 0 \tag{1.1.11}$$

与原来的拉氏函数 L 给出的拉氏方程完全相同。这一事实很容易验证，因为

$$\frac{\partial L'}{\partial q} = \frac{\partial L}{\partial q} + \frac{\partial^2 f}{\partial t \partial q} + \dot{q}\frac{\partial^2 f}{\partial q^2} \tag{1.1.12}$$

和

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L'}{\partial \dot{q}}\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)+\frac{\partial^2 f}{\partial q\partial t}+\dot{q}\frac{\partial^2 f}{\partial q^2} \tag{1.1.13}$$

我们称这种变换为规范变换, 或者广义规范变换。电磁场 ($U(1)$ 规范场) 理论中的规范变换是大家熟知的，下面 2.1.2 节中我们会看到它实际上只是现在这种普遍表述的一个具体形式。

1.1.3　Hamilton 量和正则方程

拉氏方程中时间导数是二阶的, 我们可以把方程降为一阶, 代价是独立变量加倍。定义正则动量 (canonical momentum)

$$p=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \tag{1.1.14}$$

坐标和动量为独立变量的空间称为相空间，系统的 Hamilton 量 (Hamiltonian) 定义为

$$H(q,p)=p\dot{q}-L \tag{1.1.15}$$

它是相空间 (q,p) 的函数。我们可定义相空间拉氏量

$$L(q,p)=p\dot{q}-H(q,p) \tag{1.1.16}$$

再对作用量

$$S=\int[q\dot{p}-H(q,p)]\mathrm{d}t$$

变分取极值 (最小作用量原理)

$$\begin{aligned}\delta S&=\int\left[\dot{p}\delta q+q\delta\dot{p}-\frac{\partial H}{\partial q}\delta q-\frac{\partial H}{\partial p}\delta p\right]\mathrm{d}t\\&=\int\left[\dot{p}\delta q-\dot{q}\delta p-\frac{\partial H}{\partial q}\delta q-\frac{\partial H}{\partial p}\delta p\right]\mathrm{d}t=0\end{aligned} \tag{1.1.17}$$

独立变量变分 $\delta q,\delta p$ 前系数为零，我们就能得到下面的正则方程 (canonical equation)，也称 Hamilton 方程：

$$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p} \tag{1.1.18}$$

$$\dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q} \tag{1.1.19}$$

增加了独立变量, 不仅使方程变为对称的一阶方程组, 而且正则动量的引入有更重要的意义。和拉氏方程不同，正则方程中的 Hamilton 量只有势函数, 和量子力学的 Schrödinger 方程一致。当有规范场存在时正则动量不等于力学动量, 特别是在场为零而势不为零的空间可导致拓扑量子效应 (topological quantum effect), 即

Aharonov-Bohm(AB) 效应。从正则方程的观点，AB 效应有明显的量子–经典对应 (见本书第 2 章)，只不过是量子力学中波函数的相位干涉使这一拓扑效应可被实验观测到而已。

作业 1.1　证明 Hamilton 方程在规范变换下不变。提示：正则动量和 Hamilton 量的规范变换分别表示为

$$p' = \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}}$$

$$H' = p'\dot{q} - L'$$

1.1.4　物理量的时间演化 —— Poisson 括号

相空间任意力学量 $A(q,p)$ 的时间演化可表示为

$$\frac{\mathrm{d}A(q,p)}{\mathrm{d}t} = \dot{q}\frac{\partial A}{\partial q} + \dot{p}\frac{\partial A}{\partial p} = \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} = \{A, H\} \tag{1.1.20}$$

最后一个等式中我们引入了一个重要的记号 ——Poisson 括号。若 $A(q,p)$, $B(q,p)$ 是两个力学量, 其 Poisson 括号的一般定义式为

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q} \tag{1.1.21}$$

显然

$$\{q, p\} = 1$$

作业 1.2　证明角动量 Poisson 括号，即角动量

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

各分量满足关系

$$\{L_i, L_j\} = \sum_k \epsilon_{ijk} L_k \tag{1.1.22}$$

其中, ϵ_{ijk} 是通常的反对称张量，$i = x, y, z$。

1.2　经典场，电磁场动力学正则形式

1.2.1　Maxwell 方程

真空中电磁场物理观测量是实矢量场 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$, 其微分形式的运动方程为

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 4\pi\rho \tag{1.2.1}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{B} - \frac{\partial \boldsymbol{E}}{c\partial t} = \frac{4\pi\boldsymbol{j}}{c} \tag{1.2.2}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0 \tag{1.2.3}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{c\partial t} \tag{1.2.4}$$

称为 Maxwell 方程, 这里我们使用了 Gauss 单位制。

1.2.2　规范势场和规范变换

由 Maxwell 方程 (1.2.3) 和方程 (1.2.4) 可引入矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和标量势 V，称其为规范势

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A} \tag{1.2.5}$$

$$\boldsymbol{E}=-\nabla V-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{c\partial t} \tag{1.2.6}$$

当然规范势 $\boldsymbol{A}$ 和 V 不是唯一的，我们可用规范变换引入新的规范势

$$\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla f \tag{1.2.7}$$

$$V'=V-\frac{\partial f}{c\partial t} \tag{1.2.8}$$

f 是一任意时空标量函数，显然电场强度和磁感应强度在规范变换下不变。我们总可以选适当规范使规范势满足 Lorentz 条件

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\frac{\partial V}{c\partial t}=0 \tag{1.2.9}$$

则场运动方程变为简单的形式

$$\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{c^2\partial t^2}-\nabla^2\boldsymbol{A}=\frac{4\pi\boldsymbol{j}}{c} \tag{1.2.10}$$

$$\frac{\partial^2 V}{c^2\partial t^2}-\nabla^2 V=4\pi\rho \tag{1.2.11}$$

引入四维协变坐标

$$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3,x_4=\mathrm{i}ct)$$

四维规范场矢量

$$\boldsymbol{A}=(A_1,A_2,A_3,A_4=\mathrm{i}V)$$

和四维流矢量

$$\boldsymbol{j}=(j_1,j_2,j_3,j_4=\mathrm{i}c\rho)$$

运动方程 (1.2.9)∼ 方程 (1.2.11) 则变为

$$\Box A_\mu=-\frac{4\pi j_\mu}{c},\quad \mu=1,2,3,4 \tag{1.2.12}$$

$$\sum_{\mu=1}^{4}\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu}=0 \tag{1.2.13}$$

其中

$$\Box = \sum_{\nu=1}^{4} \frac{\partial^2}{\partial x_\nu^2}$$

是 d'Alembert 算符, 方程 (1.2.13) 称为 Lorentz 条件或者 Lorentz 规范。电磁场 (1.2.5) 和 (1.2.6) 的协变形式可统一成为一反对称张量

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \tag{1.2.14}$$

其明显的矩阵形式是

$$F = \begin{pmatrix} 0 & B_3 & -B_2 & -\mathrm{i}E_1 \\ -B_3 & 0 & B_1 & -\mathrm{i}E_2 \\ B_2 & -B_1 & 0 & -\mathrm{i}E_3 \\ \mathrm{i}E_1 & \mathrm{i}E_2 & \mathrm{i}E_3 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.2.15}$$

1.2.3 电磁场动力学正则形式

为简单起见，考虑自由场方程，即电荷、电流及标势皆为零，场方程简化为

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} - \frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{c^2 \partial t^2} = 0 \tag{1.2.16}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0 \tag{1.2.17}$$

第二个方程即通常所说的横波条件，也称 Coulomb 规范，由 Lorentz 条件退化而来。可把两方程合并成一个方程

$$\sum_{j\neq i} \left(\frac{\partial^2 A_i}{\partial x_j^2} - \frac{\partial^2 A_j}{\partial x_i \partial x_j} \right) - \frac{\partial^2 A_i}{c^2 \partial t^2} = 0, \quad i = 1, 2, 3 \tag{1.2.18}$$

相应的拉氏密度可构造为

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \left[\left(\frac{\partial A_i}{c\partial t} \right)^2 - \left(\sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{i,j,k} \frac{\partial A_k}{\partial x_j} \right)^2 \right] \tag{1.2.19}$$

把该拉氏密度代入场变量是 A_i 的作用量

$$S = \int \mathcal{L} \mathrm{d}\boldsymbol{x} \mathrm{d}t$$

由最小作用量原理

$$\delta S = 0$$

可得到如下的拉氏方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial A_i/\partial t)}+\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial A_i/\partial x_j)}=0 \qquad i=1,2,3 \tag{1.2.20}$$

此即上面的自由电磁场方程 (1.2.18)。场的正则动量密度根据定义是

$$\pi_{A_i}=\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial A_i/\partial t)}=\frac{\partial A_i}{c^2\partial t} \tag{1.2.21}$$

Hamilton 密度则是熟悉的形式

$$\mathcal{H}=\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial A_i}{\partial t}\pi_{A_i}-\mathcal{L}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\left[c^2{\pi_{A_i}}^2+\left(\sum_{j,k=1}^{3}\epsilon_{i,j,k}\frac{\partial A_j}{\partial x_k}\right)^2\right]=\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{B}^2) \tag{1.2.22}$$

1.2.4　微分形式、Wedge 乘积和外微分

本书中讨论的 Aharonov-Bohm 效应、任意子和 Dirac 磁单极等必然涉及拓扑流形及微分形式的概念和运算, 虽然并不要求读者具备微分几何知识, 但有关微分形式和外微分的定义及简单公式对阅读本书的相关内容是很有用的。我们已经把电磁场写成四维协变形式，以此为例给出本书中用到的微分形式和外微分的简单公式。

1. *微分一次式*

四维势场是个矢量, 记为

$$\boldsymbol{A}=(A_1,A_2,A_3,A_4)$$

四维分基矢则分别是

$$\mathrm{d}\boldsymbol{x}=(\mathrm{d}x_1,\mathrm{d}x_2,\mathrm{d}x_3,\mathrm{d}x_4)$$

和

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}=\left(\frac{\partial}{\partial x_1},\frac{\partial}{\partial x_2},\frac{\partial}{\partial x_3},\frac{\partial}{\partial x_4}\right)$$

联络微分一次式 (connection one-form) 是一标量, 定义为

$$\omega=A\mathrm{d}x=\sum_{\mu=1}^{4}A_\mu \mathrm{d}x_\mu \tag{1.2.23}$$

本书中我们不引入场论中的协变和抗变指标, 以及求和惯例。微分算符

$$\mathrm{d}=\mathrm{d}x\frac{\partial}{\partial x}=\sum_{\mu}\mathrm{d}x_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu} \tag{1.2.24}$$

是一标量, 而一个标量函数 f 的微分一次式显然是

$$\mathrm{d}f=\sum_{\mu}\frac{\partial f}{\partial x_\mu}\mathrm{d}x_\mu \tag{1.2.25}$$

2. Wedge 乘积, 外微分和微分二次式

两个微分一次式的 Wedge 乘积是微分二次式, 定义为

$$\mathrm{d}f \wedge \mathrm{d}g = \sum_{\mu,\nu} \frac{\partial f}{\partial x_\mu} \frac{\partial g}{\partial x_\nu} \mathrm{d}x_\mu \wedge \mathrm{d}x_\nu \tag{1.2.26}$$

基矢的 Wedge 积和矢量的向量积一样

$$\mathrm{d}x_\mu \wedge \mathrm{d}x_\nu = -\mathrm{d}x_\nu \wedge \mathrm{d}x_\mu$$

不难证明

$$\mathrm{d}f \wedge \mathrm{d}g = \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} \left[\frac{\partial f}{\partial x_\mu} \frac{\partial g}{\partial x_\nu} - \frac{\partial f}{\partial x_\nu} \frac{\partial g}{\partial x_\mu} \right] \mathrm{d}x_\mu \wedge \mathrm{d}x_\nu \tag{1.2.27}$$

微分算符 d 作用在联络微分一次式 ω 上的运算称为外微分, 定义是

$$\mathrm{d}\omega = \sum_{\mu,\nu} \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} \mathrm{d}x_\mu \wedge \mathrm{d}x_\nu = \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} F_{\mu\nu} \mathrm{d}x_\mu \wedge \mathrm{d}x_\nu \tag{1.2.28}$$

称其为微分二次式 (two-form)，其中，$F_{\mu\nu}$ 即电磁场反对称张量。根据外微分定义显然有

$$\mathrm{dd} = 0 \tag{1.2.29}$$

和

$$\mathrm{d}(f\mathrm{d}g) = \mathrm{d}f \wedge \mathrm{d}g \tag{1.2.30}$$

1.2.5 时空变换和相对论

显然 Newton 点粒子方程在不同惯性系间的 Galilei 变换 (时空变换) 下不变，即所有惯性系对动力学方程都是等价的，这是旧相对论，而时空间隔在不同惯性系中不变，也就是说时空是绝对的，和运动无关。但电磁场 Maxwell 方程在光速不变条件下满足的是 Lorentz 变换，不同惯性系中时空间隔则不是必然相等的。Einstein 把相对论推广到包括电磁场在内的所有物理运动方程中, 给出了满足 Lorentz 变换的点粒子动力学，使整个物理学纳入相对论框架。Newton 方程则变为相对论方程的低速近似。而广义相对论则是相对论在非惯性系中的推广，由于非惯性系中各点的速度不等，时空间隔也不一样，自然出现时空弯曲，引力场中的弯曲时空是广义相对论的重要结论。

1.3 多体系统 —— 物理观测量的统计规律

宏观体系可还原成大量粒子组成的力学系统 (还原法, 实际上相互作用多体系统并不可能被简单地还原)，并用概率分析研究其运动状态，从而用统计规律得到宏观状态和相应的物理观测量。我们简单回顾平衡态统计的理论核心，统计物理也

是在 Lagrange 和 Hamilton 形式下建立的。考虑 N 个无相互作用全同粒子系统，为简单起见，每个粒子只有一个广义坐标。其 Hamilton 量可表示为

$$H=\sum_{i=1}^{N}H_i,\quad H_i=\frac{p_i^2}{2m}+V_i \tag{1.3.1}$$

显然，系统的状态可用 $2N$ 维相空间的一个点来描述。在相空间体积元

$$\mathrm{d}\Gamma=\prod_{i=1}^{N}\mathrm{d}q_i\mathrm{d}p_i$$

中系统状态数为

$$\mathrm{d}\Lambda=\varrho\mathrm{d}\Gamma \tag{1.3.2}$$

其中, ϱ 是相空间中的状态密度分布函数。一力学量 A 的统计平均值显然为

$$\bar{A}=\frac{1}{Z}\int A\varrho\mathrm{d}\Gamma \tag{1.3.3}$$

而

$$Z=\int\varrho\mathrm{d}\Gamma$$

表示总态数，也称为配分函数。对通常熟悉的平衡态统计而言，态密度是个守衡量，即

$$\frac{\mathrm{d}\varrho}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\varrho}{\partial t}+\sum\frac{\partial\varrho}{\partial q_i}\dot{q}_i+\sum\frac{\partial\varrho}{\partial p_i}\dot{p}_i=\frac{\partial\varrho}{\partial t}+\{\varrho,H\}=0 \tag{1.3.4}$$

称为 Liouville 方程。定义几率流密度为

$$\boldsymbol{J}=\varrho\boldsymbol{v} \tag{1.3.5}$$

其中

$$\boldsymbol{v}=\sum_{i}^{N}[\dot{q}_i\boldsymbol{e}_{q_i}+\dot{p}_i\boldsymbol{e}_{p_i}]$$

表示相空间 “速度”，而 $\boldsymbol{e}_{q_i}$ 和 $\boldsymbol{e}_{p_i}$ 分别表示 q_i，p_i 轴方向的单位矢量，上述几率守恒式等价于几率连续方程

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{J}=0 \tag{1.3.6}$$

$$\nabla=\sum_{i}^{N}\left[\boldsymbol{e}_{q_i}\frac{\partial}{\partial q_i}+\boldsymbol{e}_{p_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\right]$$

对于典型的热力学统计分布，即温度为 T 的 Boltzmann 分布，我们有

$$\varrho=\frac{1}{Z}\prod_{i=1}^{N}\mathrm{e}^{-\beta H_i}=\frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-\beta H},\quad \beta=\frac{1}{kT} \tag{1.3.7}$$

其中

$$Z = \int \mathrm{d}\Gamma \mathrm{e}^{-\beta H}$$

称为 Boltzmann 配分函数, k 是 Boltzmann 常数。力学量 A 在给定温度 T 下的统计平均值用方程 (1.3.3) 计算。

作业 1.3 求 N 个无相互作用谐振子在给定温度 T 的能量平均值

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 \right) \tag{1.3.8}$$

1.4 量子力学的逻辑体系

点粒子和场是经典世界的两个基本图像，经典理论虽然取得了巨大的成功，但在解释 19 世纪末发现的某些物理现象时，点粒子和场理论都遇到了根本性的困难。场理论的困难是无法解释黑体辐射实验规律，而点粒子系统的困难则是不能给出原子的定态结构。Planck 能量子的提出为解决前一个困难迈出了重要的一步, 而 Einstein 的光子概念则导致场量子化理论。后一个困难的完全解决产生了量子力学，它是建立在三个基本假设或者原理上的自洽理论 (至少在正则量子化公理体系内)。

1.4.1 量子力学原理一 (态矢，算符及其表示)

力学观察量对应于作用在 Hilbert 空间 (有限或无限维) 态矢量上的算符，系统的状态则用该空间的态矢量描述。物理观察量由经典理论中的数或函数 (称为 C 数) 变为算符 (相应地称为 Q 数)，C 数满足交换率，而 Q 数则一般不可对易。共轭变量算符之间满足确定的对易关系，如粒子的广义坐标算符 $\hat{q}$ 和正则动量算符 $\hat{p}$ 满足对易关系

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar \tag{1.4.1}$$

而 Bose 场的场算符 $\hat{\phi}(x,t)$ 和其对应的正则动量密度算符 $\hat{\pi}(x',t)$ 则满足对易关系

$$[\hat{\phi}(x,t), \hat{\pi}(x',t)] = \mathrm{i}\hbar\delta(x-x') \tag{1.4.2}$$

算符的表示可以是矩阵, 沿此思路，Heisenberg 发展了矩阵力学。当然，算符也可以是作用在函数 (波函数 $\psi(x)$) 上的具体运算，如微分。沿此方向，Schrödinger 发展了波动力学。Dirac 集两者之大成，引入了 Dirac 符号，从而建立了形式化的量子力学理论体系。而所谓的矩阵力学和波动力学则分别成为在 Hamilton 算符和坐标算符表象中的表示。算符不是观察量，观察量对应该算符的本征值。例如，定义 $\hat{Q}$ 算符本征方程为

$$\hat{Q}|n\rangle = q_n|n\rangle \tag{1.4.3}$$

q_n 是 $\hat{Q}$ 算符的第 n 个本征值，本征矢为 $|n\rangle$，满足正交归一关系

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \tag{1.4.4}$$

所有的本征矢构成一个完备集合 (定义了一个表象)，即

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \tag{1.4.5}$$

若本征值是连续谱，则完备性变为

$$\int |x\rangle\langle x|\mathrm{d}x = 1 \tag{1.4.6}$$

1. 态矢量的表示

本征矢的完备性意味着任意态矢都可以用此本征矢来展开，即

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle \tag{1.4.7}$$

其中, $\langle n|\psi\rangle = c_n$ 为展开系数，而列矩阵

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{1.4.8}$$

则是 $|\psi\rangle$ 态在 $\hat{Q}$ 表象中的矩阵表示。

2. 算符的表示

若 $|\psi\rangle$ 是 $\hat{A}$ 算符的本征态，其本征值为 a, 则

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle \tag{1.4.9}$$

利用完备性关系 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$，左乘 $\langle m|$(作内积) 算符本征值方程变为代数方程组

$$\sum_n \langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\psi\rangle = a\langle m|\psi\rangle \tag{1.4.10}$$

其中

$$\langle m|\hat{A}|n\rangle = A_{mn}$$

是 $\hat{A}$ 的矩阵元，$\langle n|\psi\rangle = c_n$ 是态 $|\psi\rangle$ 的展开系数. 该代数方程组可写成如下的矩阵形式：

$$A\psi = a\psi \tag{1.4.11}$$

其中, 矩阵 A 是 $\hat{A}$ 算符在 $\hat{Q}$ 表象中的表示。

3. 坐标表象

我们熟悉的坐标表象基矢是坐标算符的本征态 $|q\rangle$

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$$

本征态是正交的，因为

$$\langle q'|\hat{q}|q\rangle = q'\langle q'|q\rangle = q\langle q'|q\rangle$$

若 $q' \neq q$ 时则必须有

$$\langle q'|q\rangle = 0$$

但不能归一化为 1, 因为由完备性关系

$$\int |q'\rangle\langle q'|\mathrm{d}q' = 1$$

可得

$$\langle q|q\rangle = \int \langle q|q'\rangle\langle q'|q\rangle \mathrm{d}q' = \langle q|q\rangle\langle q|q\rangle \mathrm{d}q \tag{1.4.12}$$

如果

$$\langle q|q\rangle = 1$$

显然导致矛盾，因为 $\mathrm{d}q$ 是无限小，只能有

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q-q') \tag{1.4.13}$$

$\delta(q-q')$ 是 Dirac δ 函数。下面我们来推导坐标表象中动量的算符形式及其本征波函数：由对易关系

$$[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$$

可得

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}|x'\rangle = (x-x')\langle x|\hat{p}|x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\delta(x-x') \tag{1.4.14}$$

再由 δ 函数的特性，不难得到坐标表象中的动量算符矩阵元是

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x-x') \tag{1.4.15}$$

假定 $|p\rangle$ 是动量算符的本征态, 对应的本征值为 p, 即

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

投影到坐标表象

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = p\langle x|p\rangle$$

再插入坐标表象的完备性关系得到坐标表象中动量本征方程为

$$\int \langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|p\rangle \mathrm{d}x' = -\mathrm{i}\hbar\int \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x-x')\psi_p(x')\mathrm{d}x' = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_p(x) = p\psi_p(x) \quad (1.4.16)$$

因而动量算符在坐标表象中的算符形式是

$$\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \quad (1.4.17)$$

动量本征方程的解, 即动量本征态波函数为

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\mathrm{i}px/\hbar) \quad (1.4.18)$$

其实动量表象和坐标表象完全等价，从坐标和动量对易关系出发，和上述推导一样可得到动量表象中坐标算符的本征方程

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\psi_x(p)}{\mathrm{d}p} = x\psi_x(p) \quad (1.4.19)$$

1.4.2 量子力学原理二 (动力学)

量子力学公理化体系始于物理量的算符化，动力学当然从算符的时间演化开始，算符时间演化遵从 Heisenberg 方程, 是作为基本原理引入的

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{A},\hat{H}] \quad (1.4.20)$$

时间演化算符，Heisenberg 和 Schrödinger 绘景

假定力学量算符 $\hat{A}$ 不显含时间, 则其 Heisenberg 方程的形式解显然是

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}(0)\hat{U}(t) \quad (1.4.21)$$

其中

$$\hat{U}(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t} \quad (1.4.22)$$

称为时间演化幺正算符。任意时刻力学量算符在一个确定的量子态 $|\psi\rangle$(不随时间演化) 上的期待值为

$$\bar{A}(t) = \langle\psi|\hat{A}(t)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}(0)\hat{U}(t)|\psi\rangle \quad (1.4.23)$$

算符随时间演化而态不变的描述称为 Heisenberg 绘景。当然也可定义时间演化态

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle \quad (1.4.24)$$

则期待值随时间演化的描述变为态随时间变化，而算符不变，称为 Schrödinger 绘景

$$\bar{A}(t) = \langle\psi(t)|\hat{A}(0)|\psi(t)\rangle \quad (1.4.25)$$

显然，含时态 $|\psi(t)\rangle$ 满足 Schrödinger 方程，即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{1.4.26}$$

投影到坐标表象中 (方程 (1.4.26) 两边作内积 $\langle x|$)，则得到坐标表象中的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\psi(x,t) \tag{1.4.27}$$

1.4.3 量子力学原理三 (测量假设)

在某算符的本征态上测相应的物理量，可得到确定值，即该本征态的本征值。在态 $|\psi\rangle$ 上测量某算符 $\hat{Q}$ 对应的物理量值，而 $|\psi\rangle$ 不是 $\hat{Q}$ 的本征态时，则每次测量得到的值只能是 $\hat{Q}$ 的本征值中的一个，但不能确定是哪一个。多次测量后可得到该力学量的平均值

$$\bar{Q} = \langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 q_n \tag{1.4.28}$$

这里 $|n\rangle$ 是 $\hat{Q}$ 的本征态，相应的本征值是 q_n

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \tag{1.4.29}$$

假定 $|\psi\rangle$ 态规一

$$\sum_n |c_n|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{1.4.30}$$

$|c_n|^2$ 是多次测量后得到本征值 q_n 的概率。

1.4.4 量子力学原理的三个重要推论 (测不准关系，非定域性，宏观量子态的相干叠加——Schrödinger 猫态)

1. 测不准关系

不对易的算符一般不可能有共同本征态，因而不能同时得到确定的测量值。需要指出的是，所谓的“测不准原理”其实并不是一条“原理”，它仅是量子力学原理的一个推论。从两算符的对易关系，容易求得其偏差满足的公式称为测不准关系，例如坐标和动量 $[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$ 的测不准关系是

$$\Delta x\Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

其中, Δ 表示方均根偏差。

2. 非定域性 —— 纠缠态和 Bell 不等式

量子态的相干叠加和测量原理共同产生了量子力学最奇异的非定域特性，没有经典对应。假定测量前系统处于多个本征态的叠加态，根据测量理论，测量操作会使系统塌缩到其中一个本征态。例如, 可制备两粒子自旋叠加态 —— 自旋单态

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle - |-,+\rangle) \tag{1.4.31}$$

其中 $|\pm\rangle$ 是自旋本征态

$$\hat{\sigma}_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$$

而

$$|+,-\rangle = |+\rangle_1|-\rangle_2$$

是两粒子自旋态直积。$|\psi\rangle$ 称为两自旋纠缠态。显然在 $|\psi\rangle$ 态上的两粒子自旋既可能向 “上” 也可能向 “下”，完全不确定，若该量子态制备好后把两两粒子分开为类空间隔 (在测量的时间内光也无法到达)，并保持其纠缠性。当在同一方向上对其中一粒子进行自旋测量并得到确定值时，空向分离的另一粒子的自旋则完全确定。这就是著名的 EPR(Einstein-Podolsky-Rosen) 佯谬，由 Einstein 等三人提出，用于质疑量子力学的完备性 (他们原来的文章用的是连续变量纠缠态)。方程 (1.4.31) 表示的自旋系统最早由 Bohm 提出，现称为 EPRB 模型。基于经典几率理论和定域确定性 (见注解)两个基本假设，Bell 证明了 EPRB 模型中空间分离的两粒子自旋测量结果的关联满足一个不等式，即著名的 Bell 不等式。其重要意义是，首次把哲学意义上的量子力学完备性讨论变成一实际的物理问题，即有观察量及满足的方程，并可被实验检验。目前，已存在量子力学违反 Bell 不等式的实验事例，这种违反的物理意义仍是值得研究的问题。能确定的是，迄今还未有任何实验结果违反了量子力学预言，而纠缠态概念则日益显示其重要性，它已成为量子密码、保密通信和量子计算中并行运算的理论基础。

3. 宏观量子态的相干叠加 ——Schrödinger 猫态

量子力学的创始人之一 Schrödinger 同样质疑量子力学的测量原理，他提出的死猫和活猫态的相干叠加态已成为宏观量子相干态的代名词。当然无法制备相干的活猫、死猫态，但现在的技术已可制备出宏观态的相干叠加，如光学中的相干态叠加和分子磁体中两简并宏观磁矩态的相干叠加。过去, 这些争论只具有哲学的意义, 现在的量子技术已使实验检验成为可能。由于近年来在量子光学和纳米技术方面的进步，允许人们对宏观量子效应、量子效应的宏观极限，以及量子–宏观渡越

注解：确定性指系统具有内在的确定测量结果 (conter-factual definiteness)，已经证明，定域确定性理论即定域隐参数理论。

进行更深入的研究，这些基础研究又反过来促进了量子技术和器件的发展，未来应是量子技术时代。

1.4.5 态密度算符

1. 态密度算符, 纯态和混合态

量子系统的状态也可用算符来表示，且更具有普遍性。量子态 $|\psi\rangle$ 的态密度算符定义为

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{1.4.32}$$

而力学量在该态上的期望值是

$$\bar{A} = \mathrm{Tr}\hat{\rho}\hat{A} = \sum_n \langle n|\hat{\rho}\hat{A}|n\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}|n\rangle = \sum_n \langle\psi|\hat{A}|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \tag{1.4.33}$$

其中 $|n\rangle$ 是任意完备基矢. 量子纯态可以用任意正交归一基矢展开

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle$$

密度算符则可表示为

$$\hat{\rho} = \sum_i |\lambda_i|^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(\lambda_i\lambda_j^*|\psi_i\rangle\langle\psi_j| + \lambda_i^*\lambda_j|\psi_j\rangle\langle\psi_i|) \tag{1.4.34}$$

相应地, 力学量的期望值可表示为

$$\bar{A} = \mathrm{Tr}\hat{\rho}\hat{A} = \sum_i |\lambda_i|^2\langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}(\lambda_i\lambda_j^*\langle\psi_j|\hat{A}|\psi_i\rangle + \lambda_i^*\lambda_j\langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle) \tag{1.4.35}$$

纯态密度算符显然有下面的特性:

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \tag{1.4.36}$$

$$\mathrm{Tr}(\hat{\rho})^2 = \mathrm{Tr}\hat{\rho} = 1 \tag{1.4.37}$$

对于经典几率混合态，则不存在量子相干性，对应于方程 (1.4.34) 和方程 (1.4.35) 中，所有的交叉项都为零，而只有对角元部分。所以，经典几率态的密度算符是

$$\hat{\rho}_m = \sum_i |\lambda_i|^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \tag{1.4.38}$$

显然，

$$\hat{\rho}_m^2 = \sum_i |\lambda_i|^4 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \neq \hat{\rho}_m \tag{1.4.39}$$

一般情况，

$$\mathrm{Tr}\hat{\rho}^2 \leqslant 1 \tag{1.4.40}$$

等号是纯态, 其他则为混合态。态密度算符的动力学演化满足 Heisenberg 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho} = [\hat{\rho}, \hat{H}] \tag{1.4.41}$$

其经典对应是本章第三节中的 Liouville 方程 (1.3.4)。

2. 力学量的热力学平均值

用态密度算符，物理量在量子态上的期待值和热力学的平均值形式一样，例如，前面讨论过的 Boltzmann 态密度量子化后变为算符

$$\hat{\rho} = \frac{\mathrm{e}^{\beta\hat{H}}}{Z} \tag{1.4.42}$$

$Z = \mathrm{Tre}^{\beta\hat{H}}$ 是配分函数，物理量的热力学平均值和方程 (1.4.33) 有同样形式，即 $\hat{A} = \mathrm{T}_r\bar{\rho}\bar{A}$。

作业 1.4　求温度为 T 时谐振子能量的平均值，谐振子 Hamilton 算符

$$\hat{H} = \omega\hbar\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

对易关系

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

本征态

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$$

1.4.6　量子力学中的规范变换

我们先给出规范变换的一般性表述：假定一普遍的含时幺正算符 $\hat{U}(t)$ 作用在含时 Schrödinger 方程上，立即得到在新规范下形式不变的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi'\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}'(t)|\psi'\rangle \tag{1.4.43}$$

其中

$$|\psi'\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle$$

和

$$\hat{H}'(t) = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - \mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\partial\hat{U}^\dagger}{\partial t} \tag{1.4.44}$$

则分别是新规范中的态矢和 Hamilton 算符。对于 $U(1)$ 规范变换 (见本书第 2 章), 把幺正算符的具体形式代入 $\hat{H}'(t)$ 的普遍表达式, 则可证明, Hamilton 算符的变换和电磁场理论中的规范变换完全一致。

1.4.7 量子–经典对应和经典极限

1. 量子–经典对应

量子–经典对应 (quantum-classical correspondence) 和量子力学的经典极限是从量子力学建立时起就引起极大关注的问题，现在，这一问题的研究已不仅仅具有理论意义，且可产生技术应用。量子–经典对应有两种描述：

(1) 大量子数极限下，量子理论和经典理论趋于一致，在这种情况下 Planck 常量和量子数的取值相比较可忽略不计，若对量子力学方程取极限 $\hbar\to 0$，则退化为经典方程。

(2) 在宏观量子态上，力学量算符期待值的时间演化和经典动力学方程完全一致，如力学量算符 $\hat{A}$ 的 Heisenberg 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}=[\hat{A},\hat{H}] \tag{1.4.45}$$

在宏观量子态 (满足测不准关系的最小偏差) 上的期待值和经典方程形式一样。谐振子相干态和自旋相干态都是宏观量子态的例子。自旋 $-\frac{1}{2}$ 相干态及量子–经典对应在本书第 3 章中论述, 而高自旋相干态则在第 5 章讨论。

作业 1.5 证明谐振子相干态上坐标和动量算符的期待值时间演化方程和经典方程形式完全相同。

提示：已知谐振子相干态为

$$\hat{a}|\alpha\rangle=\alpha|\alpha\rangle$$
$$|\alpha\rangle=\sum_n\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}|n\rangle$$

Hamilton 算符可用无量纲的坐标和动量表示为

$$\hat{H}=\frac{\omega\hbar}{2}[\hat{x}^2+\hat{p}^2]$$

对易关系是 $[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}$

$$\hat{x}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger),\quad \hat{p}=\frac{1}{\sqrt{2}\mathrm{i}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$$

相应的经典 Hamilton 量是

$$H=\frac{\omega\hbar}{2}(x^2+p^2)$$

Hamilton 方程为

$$\dot{x}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial H}{\partial p}=\omega p$$

$$\dot{p} = -\frac{1}{\hbar}\frac{\partial H}{\partial x} = -\omega x$$

经典 Hamilton 量中的 $\hbar$ 只是一表示量纲的常数, 和量子化无关。

2. Schrödinger 方程的经典极限和流体力学方程 ——Bohm 隐参数理论

把波函数看作隐参数 (hidden variable), 其满足的是 Schrödinger 方程，波函数可被因式化成振幅和相位

$$\psi(\boldsymbol{x}) = A(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(\boldsymbol{x},t)} \tag{1.4.46}$$

代入 Hamilton 算符是

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x})$$

的含时 Schrödinger 方程，得到实部和虚部分别满足的方程为

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2 A}{A} \tag{1.4.47}$$

$$m\frac{\partial A}{\partial t} + \nabla A \cdot \nabla S + \frac{A}{2}\nabla^2 S = 0 \tag{1.4.48}$$

V 表示势函数。几率密度和几率流密度分别是

$$\rho = |\psi|^2 = A^2$$

$$\boldsymbol{J} = \rho\frac{\nabla S}{m}$$

方程 (1.4.48) 则变为连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{J} = 0 \tag{1.4.49}$$

再定义流速度

$$\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{J}}{\rho}$$

对方程 (1.4.47) 求梯度则得到熟悉的动力学方程

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = -\nabla(V + Q) \tag{1.4.50}$$

其中

$$Q = -\hbar^2\frac{\nabla^2 A}{2mA}$$

称为量子势，方程 (1.4.49) 和方程 (1.4.50) 又称为 Schrödinger 方程的流体力学形式。

经典近似：$\hbar = 0$, 即 $Q = 0$, 方程 (1.4.50) 则变为和 Newton 方程的形式完全相同。

量子势的出现被解释为量子力学的非定域性，因为流速度不仅由局域势场 V 确定而且依赖存在于整个空间的波函数。

3. WKB 近似

Wenzel, Kramers 和 Brillonin 提出了一个解 Schrödinger 方程的准经典近似方法，称为 WKB 近似。考虑一维空间情况，能量为 E 的定态解记为

$$S(\boldsymbol{x}) = W(\boldsymbol{x}, E) - Et$$

则流体力学方程 (1.4.47) 和方程 (1.4.48) 可约化为

$$W'^2 - 2m(E - V) = \hbar^2 \frac{A''}{A} \tag{1.4.51}$$

$$2A'W' + AW'' = 0 \tag{1.4.52}$$

其中 “$'$” 表示空间导数, 例如 $W' = \dfrac{\mathrm{d}W(x)}{\mathrm{d}x}$。从方程 (1.4.52) 可得到关系式

$$A = W'^{-\frac{1}{2}}$$

代入方程 (1.4.51) 则有

$$W'^2 = 2m(E - V) + \hbar^2 \left[\frac{3}{4}(\frac{W''}{W'})^2 - \frac{1}{2}\frac{W'''}{W'}\right] \tag{1.4.53}$$

W 按 $\hbar$ 的幂级数展开

$$W = W_0 + \hbar W_1 + \cdots$$

代入上式，只取零阶即 WKB 近似

$$W_0' = \sqrt{2m[E - V(x)]}$$

代入方程 (1.4.46), 得到 WKB 近似波函数是

$$\psi = \frac{c}{(2m[E - V(x)])^{\frac{1}{4}}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int \sqrt{2m[E-V(x)]}\mathrm{d}x} \tag{1.4.54}$$

其中 c 是适当的归一化常数。如果在势垒区域中，$E < V(x)$，量子隧穿率的 WKB 因子 (图 1.4.1) 则为

$$F = \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[E-V(x)]}\mathrm{d}x} \tag{1.4.55}$$

需要说明的是，方程 (1.4.55) 是两简并态之间的共振隧穿率 WKB 因子，如第 5 章中的双势阱情况。若是亚稳态的隧穿衰变，即图 1.4.1 势垒左边是个亚稳态 (参看第 5 章)，隧穿率公式 (1.4.55)e 指数上有一因子 “2”。

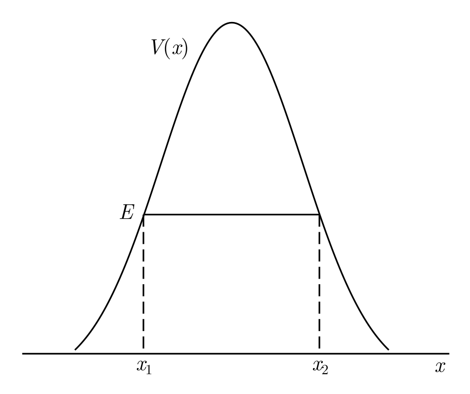


图 1.4.1　量子隧穿的 WKB 近似

参 考 文 献

Bell J S. 1966. On the problem of hidden variables in quantum mechanics. Rev. Mod. Phys., 38: 447

Bertlmann R A, Zeilinger A. 2002. Quantum (Un)Speakables. Springer Verlag; Peres A. 1993. Quantum Theory: Concepts and Methods. Kluwer, Dordrecht

Bohm D. 1952. A Suggested interpretation of the quantum theory in terms of “hidden” variables. II Phys. Rev., 85: 180

Bohm D. 1954. Quantum Theory. Prentice Hall Inc.

Dirac P A M. 1958. Principles of Quantum Mechanics. Oxford: Oxford University Press

Einstein A, Podolsky B, Rosen N. 1935. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? Phys. Rev., 47: 777

Herbert Goldstein. 1981. Classical Mechanics. Second Edition. Addison-Wesley Publishing Company

Jacson J D. 1975. Classical Electrodynamics. Second Edition. John Wiley and Sons, Inc.

Kittel C. 1958. Elementary Statistical Physics. John Wiley and Sons, Inc.

Landau L D. 1977. Quantum Mechanics. Vol.3 of Course of Theoretical Physics, third revised edition (Pergamon, 1977)

Müller-Kirsten H J W. 2004. Electrodynamics: an Introduction Including Quantum Effects. World Scientific

Müller-Kirsten H J W. 2008. Classical Mechanics and Relativity. World Scientific

Schiff L L. 1968. Quantum Mechanics. McGraw-Hill Company

Takabayasi T. 1952. On the formulation of quantum mechanics associated with classical pictures. Prog. Theor. Phys., 8: 143

第 2 章　Aharonov-Bohm 效应、奇异规范变换和 Dirac 磁单极

2.1　电磁场中带电粒子的经典动力学

众所周知, 在经典力学中只有磁场和电场是基本物理量, 而矢量势和标量势只是理论计算中引出的辅助场变量，无直接的观察效应, 并且, 势函数并不是唯一确定的，可用规范变换改变。但在量子力学 Schrödinger 方程中却只有势而无场变量，1959 年 Aharonov 和 Bohm 提出一个非常基本的问题，即在量子力学中势是比场更基本的物理量, 且在力场为零但势不为零的空间可有观察效应，换句话说，力场为零的纯规范势有可观察的效应，这就是著名的 Aharonov-Bohm 效应, 简称 AB 效应。更具体地说，又可分为矢势和标势 AB 效应。AB 效应有极重要的基础理论意义和技术应用价值，它是 Dirac 磁单极的理论基础，超导体 Josephson 隧道结宏观量子隧穿的核心，并产生了超导量子干涉仪。20 世纪 80 年代发展的介观物理起源于介观环中的电流振荡，是 AB 效应的直接应用。直到今天，介观输运和 AB 振荡都是重要的研究题目。我们从带电粒子在电磁场中的经典运动方程着手，指出局域磁通的矢势在带电粒子拉氏量中产生一 Wess-Zummino 拓扑相互作用项，在量子力学层面它既可产生和经典力学对应的动力学效应，也可有纯拓扑相位效应，后者正是 Wilczek 任意子的量子力学模型。

我们从经典力学正则方程出发，强调经典–量子对应，为此，考虑质量为 m、电荷为 q 的带电粒子在电场强度为 $\boldsymbol{E}$、磁感应强度为 $\boldsymbol{B}$ 的电磁场中运动。其经典运动方程是

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}=q\boldsymbol{E}+\frac{q}{c}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{B} \tag{2.1.1}$$

显然方程中只有场变量, 没有势。为得出量子–经典对应，我们给出相应的正则变量和正则方程。容易验证，系统的拉氏量是

$$L(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}},t)=\frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)^2-qA_0+\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \tag{2.1.2}$$

其中, 时空函数 $\boldsymbol{A}$, A_0 分别是电磁场的矢量势和标量势

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A},\quad \boldsymbol{E}=-\nabla A_0-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{2.1.3}$$

作业 2.1　验证拉氏量 (2.1.2) 的正确性, 把拉氏量代入拉氏方程 (1.1.7)(相应的空间三维形式), 应得到运动方程 (2.1.1)。

2.1.1　正则动量和力学动量

正则动量根据定义是，

$$\boldsymbol{p} = \nabla_{\boldsymbol{v}} L = m\boldsymbol{v} + \frac{q}{c}\boldsymbol{A} \tag{2.1.4}$$

从而得到这一系统的 Hamilton 量

$$H = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v} - L = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + qA_0 \tag{2.1.5}$$

这里 $\boldsymbol{v} = \mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t$ 是粒子速度

$$\nabla_{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{e}_x\frac{\partial}{\partial v_x} + \boldsymbol{e}_y\frac{\partial}{\partial v_y} + \boldsymbol{e}_z\frac{\partial}{\partial v_z}$$

力学动量是

$$m\boldsymbol{v} = m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}$$

我们看到, 有和速度相关的力存在时, 力学动量和正则动量不相等。正则运动方程是

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \nabla_{\boldsymbol{p}} H = \dfrac{1}{m}\left(\boldsymbol{p} - \dfrac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) \\ \dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\nabla H = \dfrac{q}{c}\boldsymbol{v}\cdot\nabla\boldsymbol{A} + \dfrac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\nabla\times\boldsymbol{A} - q\nabla A_0 \end{cases} \tag{2.1.6}$$

其中符号

$$\nabla_{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{e}_x\frac{\partial}{\partial p_x} + \boldsymbol{e}_y\frac{\partial}{\partial p_y} + \boldsymbol{e}_z\frac{\partial}{\partial p_z}$$

显然，拉氏量、Hamilton 量和正则运动方程中，原则上只显含矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和标量势 A_0，研究量子–经典对应，应从正则方程着手。强调这一点至关重要, 从正则方程出发, 我们才可以看到量子与经典之间的一一对应。

2.1.2　规范变换

当然，在经典力学中，电磁场的矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和标量势 A_0 仅是辅助变量而非直接的物理观测量，且它们不是唯一确定的，我们总可以通过某种变换找到一组新的矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和标量势 A_0，并保证电场和磁场强度不变。这种最早在电磁场理论中引入的变换称之为规范变换。在本书的第 1 章中我们已引入一个广义规范变换，即在拉氏量中加一任意时空函数的时间全导数，Newton 运动方程不变。我们来证

明，该广义规范变换在电磁场情况下就是通常定义的规范变换。为此，我们在方程 (2.1.2) 的拉氏量中加一任意时空函数的时间全导数，在新规范中拉氏量变为

$$\begin{aligned} L \longrightarrow L' = L + \frac{q}{c}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} &= L + \frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{q}{c}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\cdot\nabla f \\ &= \frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)^2 - qA_0' + \frac{q}{c}\boldsymbol{A}'\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \end{aligned} \tag{2.1.7}$$

运动方程当然是规范变换不变的。这里

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla f \tag{2.1.8}$$

和

$$A_0' = A_0 - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t} \tag{2.1.9}$$

分别是新规范下电磁场的矢量和标量势，这正是通常电磁场理论中的规范变换，电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 在规范变换下不变。在新规范下正则动量变为

$$\boldsymbol{p}' = \nabla_{\boldsymbol{v}} L' = m\boldsymbol{v} + \frac{q\boldsymbol{A}'}{c} \tag{2.1.10}$$

而粒子的力学动量 $m\boldsymbol{v}$ 是规范不变的。容易验证

$$\boldsymbol{E} = -\nabla A_0' - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}'}{\partial t} = -\nabla A_0 - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{2.1.11}$$

$$\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}' = \nabla\times\boldsymbol{A} \tag{2.1.12}$$

$$m\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{p}' - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}' \tag{2.1.13}$$

2.2 带电粒子在局域磁通矢势场中的经典动力学

Aharonov 和 Bohm 在他们论述 AB 效应的著名文章中考虑带电粒子在一无限长通电螺线管外运动，在这一区域磁场为零，但有非零的矢势，因而，任何依赖于螺线管内总磁通的观测效应都可看成是由矢量势引起的，这当然是矢势 AB 效应。因为系统有沿螺线管轴向的平移不变性，所以我们只需考虑粒子在垂直于螺线管轴线的平面内的运动。

2.2.1 局域磁通的矢势和多连通空间 —— 拓扑流形

我们考虑的组态空间是一个有孔的二维平面，它和圆环 (S^1) 是拓扑等价的 (homoeomorphic)，称为拓扑流形 (topological manifold)，因为它没有原点，不能定义零矢量，也不存在一常数矢量场，因而不具备线性空间结构，类似的流形例子是球面 (S^2)，它是 Dirac 磁单极理论的空间。流形

$$M = R^2 - \Delta \tag{2.2.1}$$

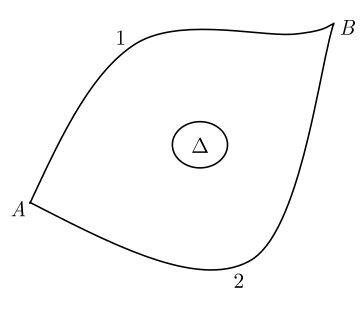


图 2.2.1 多连通空间

是路径连通，且是多连通空间。有公共端点的任意两路径可经连续变化重合在一起的，称为单连通空间，否则为多连通空间。如图 2.2.1 所示, 分别绕过孔 Δ 两边的路径 1 和 2 就不可能重合。我们将会看到，正是多连通空间提供了存在分数角动量和任意子统计的可能性。

局域于 Δ 内和平面垂直的线磁通 Φ 在流形 M 内的磁场强度为零，但势不为零。在以线磁通位置为原点的直角坐标系内，矢势 $\boldsymbol{A}$ 的表达式为

$$\boldsymbol{A}=\frac{\Phi}{2\pi(x^2+y^2)}(x\boldsymbol{e}_y-y\boldsymbol{e}_x) \tag{2.2.2}$$

其中, $\boldsymbol{e}_x$，$\boldsymbol{e}_y$ 分别是 x，y 方向的单位矢量。在平面极坐标内

$$\boldsymbol{A}=\frac{\Phi}{2\pi r}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{2.2.3}$$

$$r=\sqrt{x^2+y^2}$$

$\boldsymbol{e}_\varphi$ 是极角方向的单位矢量。很容易证明，除原点外磁场为零

$$\nabla\times\boldsymbol{A}=0,\quad r>0$$

原点是奇点。

2.2.2 局域磁通引出的拓扑相互作用项：Wess-Zumino 项

电荷为 e 的带电粒子在磁通线矢势场中的拉氏量可表示为

$$L=L_0+L_{\mathrm{WZ}} \tag{2.2.4}$$

其中

$$L_0=\frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)^2$$

是自由粒子拉氏量。而磁通引起的相互作用项 L_{WZ} 具有规范变换的形式，但不是规范变换，称为 Wess-Zumino 项，可表示为

$$L_{\mathrm{WZ}}=\frac{e\boldsymbol{A}}{c}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{e}{c}\frac{\Phi}{2\pi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} \tag{2.2.5}$$

其中，φ 是角度，不是一个正规函数，因此 L_{WZ} 不是一个正规函数的时间全导数，作用量

$$S_{\mathrm{WZ}} \sim \int \mathrm{d}\varphi$$

不可积，称其为 Wess-Zumino 拓扑相互作用项。用微分几何的语言，在流形 M 上的微分一次式 (one form)$\mathrm{d}\varphi$ 是封闭的 (closed), 因为微分二次式 (two-form) 为零

$$\mathrm{dd}\varphi = 0$$

即磁场是零，但 $\mathrm{d}\varphi$ 不是一个函数的全微分 (φ 本身不是个函数)，因而不可积，是非确定的 (not exact)。量子力学中，Wess-Zumino 拓扑相互作用项仍可产生观测效应，即 AB 效应，或者拓扑效应，这已是众所周知的事实。我们的问题是，从经典力学的观点来看，局域在 Δ 内的磁通能否对 M 区域的带电粒子产生影响？M 内磁场为零，虽不可能对带电粒子产生作用力，但

$$\varPhi = \oint \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} \tag{2.2.6}$$

是规范变换不变量，应有物理效应，例如，可影响经典解的初条件。而粒子的运动状态是由运动方程和初条件共同决定的。

2.2.3 Wess-Zumino 项的经典效应

为论述拓扑相互作用项的经典效应，我们考虑一个理想模型，即带电粒子被约束到一半径为 R 的光滑环上。拉氏量则变为

$$L = \frac{1}{2} I^2 \left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}\right)^2 + L_{\mathrm{WZ}} \tag{2.2.7}$$

我们选角度 φ 为广义坐标，和其共轭的是正则角动量

$$L_z = \frac{\partial L}{\partial(\mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}t)} = I\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} + \eta \tag{2.2.8}$$

(定轴转动角动量，下标表示转轴是 z 轴) 其中

$$\eta = \frac{e\varPhi}{2\pi c} \tag{2.2.9}$$

是具有角动量量纲的数

$$I = mR^2$$

是转动惯量。Hamilton 量是

$$H = \frac{1}{2I}(L_z - \eta)^2 \tag{2.2.10}$$

正则方程为

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial H}{\partial L_z}=\frac{L_z-\eta}{I} \tag{2.2.11}$$

$$\frac{\mathrm{d}L_z}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial H}{\partial \varphi}=0 \tag{2.2.12}$$

角动量是守恒量。我们由初条件的选取可得到两类解。

1. 解一: 磁通引起的力学角动量改变

正则方程 (2.2.12) 表示正则角动量守恒，我们可选正则角动量为零，即 $L_z=0$, 而力学角动量可由正则方程 (2.2.11) 得到

$$L_z^k=I\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}=-\eta \tag{2.2.13}$$

该解从经典力学的观点很容易理解，固定磁通的矢势虽然对粒子没有作用力，但当磁通建立时，感生的电场对带电粒子有一力矩作用，从而改变初始条件。因为力学角动量的变化等于力矩冲量，假定磁通在 T 时间内由零变为 $\varPhi$, 即 $\varPhi(0)=0$, $\varPhi(T)=\varPhi$, 很容易计算力学角动量的变化，结果是

$$L_z^k=R\int_0^T e\boldsymbol{E}\mathrm{d}t=-eR\int_0^T\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}\mathrm{d}t=-\frac{e}{c2\pi}\int_0^T\frac{\mathrm{d}\varPhi(t)}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t=\frac{-e\varPhi}{c2\pi}=-\eta \tag{2.2.14}$$

引入磁通量子单位

$$\varPhi_0=\frac{ch}{e} \tag{2.2.15}$$

则力学角动量可表示为

$$L_z^k=-\hbar\alpha \tag{2.2.16}$$

其中

$$\alpha=\frac{\varPhi}{\varPhi_0}$$

是一无量纲常数, 表示以磁通量子单位计量的磁通量。依赖于磁通的力学角动量有完全明确的物理意义, 是纯力学效应。当然，带电粒子的固定力学角动量解在经典力学中是不稳定的，由于向心加速度存在，会产生辐射场，带电粒子的匀速圆周运动会被辐射阻尼。

2. 解二: 磁通引起的正则角动量变化

我们当然也可选

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}=0$$

即力学角动量为零, 由正则方程 (2.2.11) 得到正则角动量为

$$L_z=\eta=\alpha\hbar \tag{2.2.17}$$

这一解的物理意义也很清楚, 带电粒子是在磁通建立后才放置在光滑环上, 未受到感生电场的作用。因正则角动量在经典力学中并不对应力学观察量，单从裸粒子观点，非零的正则角动量在经典力学中的意义并不清楚，但从场论的角度，作业 2.2 的结果显示，在这种情况下，正则角动量事实上等于磁通在运动的带电粒子电场中的内禀角动量。我们会看到，在量子力学中两种经典解都有其对应物，而且都有明确的物理意义及观察效应。

作业 2.2　考虑在光滑圆环上运动的带电粒子, 磁通不随时间变化。

(1) 求磁通的内禀角动量;

(2) 求粒子旋转一周后, 磁通的标量势 AB 相位, 和内禀角动量的值及粒子的矢量势 AB 相位比较。

提示：把磁通看成小磁矩的叠加延展, 在相对粒子运动的坐标系中, 磁矩感受到一磁场。

2.3　拓扑相互作用项的量子力学效应：Aharonov-Bohm 效应

2.3.1　量子力学中的规范变换——$U(1)$ 规范变换

我们已经论证，局域磁通虽然对带电粒子无力的作用，但拉氏量中出现一个拓扑相互作用项，正则方程可有两类解, 分别是非零的力学和正则角动量。我们来看量子力学中的对应解及其观测效应，为此，先给出带电粒子在电磁场中的 Schrödinger 方程和规范变换，用第 1 章中的记号, 含时 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$$

中 Hamilton 算符的一般形式是

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+eA_0 \tag{2.3.1}$$

量子力学中，带电粒子和电磁场相互作用规范变换幺正算符的形式是

$$\hat{U}(t)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}e}{c}f(\boldsymbol{r},t)} \tag{2.3.2}$$

其中, $f(\boldsymbol{r},t)$ 是一时空函数, 这一形式的规范变换称为 $U(1)$ 变换, 第 1 章方程 (1.4.43) 在坐标表象中是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t}=\hat{H}'\psi'$$

新规范中 Hamilton 算符 (第 1 章方程 (1.4.44)) 则变为

$$\hat{H}'=\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2+eA_0' \tag{2.3.3}$$

我们得到在新规范中的矢势

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla f \tag{2.3.4}$$

和标量势

$$A_0' = A_0 - \frac{\partial f}{c\partial t} \tag{2.3.5}$$

这正是电磁场的规范变换。

波函数的变换是

$$\psi' = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}e}{c}f(\boldsymbol{r},t)}\psi \tag{2.3.6}$$

能量本征方程 $\hat{H}\psi = E\psi$ 和本征值 E 只在不含时的规范变换下不变

$$\hat{H}'\psi' = E\psi' \tag{2.3.7}$$

其中 $U(1)$ 幺正变换算符

$$\hat{U} = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}e}{c}f(\boldsymbol{r})}$$

中的规范函数不显含时间

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

因而

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2 + eA_0 \tag{2.3.8}$$

2.3.2 束缚态 AB 效应：一个最简单的拓扑场论模型

有局域磁通 $\varPhi$ 穿过圆心，半径为 R 的光滑圆环上带电粒子 (即 2.2.3 节中讨论的“toy”模型) 的定态 Schrödinger 方程

$$\frac{-\hbar^2}{2I}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - \mathrm{i}\alpha\right)^2\psi = E\psi \tag{2.3.9}$$

的解，根据波函数单值性要求，显然是

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\varphi} \tag{2.3.10}$$

对应的正则角动量本征值

$$l_c = n\hbar \tag{2.3.11}$$

是整数量子化的,n 是整数。能量本征值为

$$E_n = \frac{\hbar^2(n-\alpha)^2}{2I} \tag{2.3.12}$$

力学角动量为

$$l_k = (n-\alpha)\hbar \tag{2.3.13}$$

该解显然是经典解一的量子力学对应，力学角动量依赖磁通 α，原因和经典解释完全一样，是磁通建立时感生电场作用的结果。然而，无经典对应的新奇结果是当 α 为整数时，即磁通是量子单位的整数倍时，能谱和自由转子完全一样。整数磁通不引起任何量子观察效应，这种现象早已被 Dirac 注意到，并据此推出了磁单极概念。能谱随磁通的变化如图 2.3.1 所示，该系统存在无穷多的简并基态，不同基态动力学上完全等价，区别仅仅是拓扑量子数不同，这是一个最简单的拓扑量子场论模型。

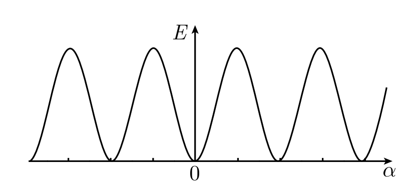


图 2.3.1　拓扑量子数不同的简并基态

2.3.3　Dirac 不可积相因子——AB 相位

一个十分有趣而且具有根本性的问题是，何为经典解二的量子力学对应？为此，我们采用 Dirac 在他著名的论证磁单极的论文中首次引入的不可积相因子概念。有矢势的 Schrödinger 方程

$$\frac{1}{2m}\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi=E\psi \tag{2.3.14}$$

的形式解可写为

$$\psi=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\int \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}}\psi_0 \tag{2.3.15}$$

其中, ψ_0 满足自由粒子 Schrödinger 方程

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_0=E\psi_0 \tag{2.3.16}$$

ψ_0 前的 “e” 指数相因子是依赖路径的不定积分，称为 Dirac 不可积相因子。应该特别强调的是 ψ_0 和 ψ 之间绝非一规范变换，因为相因子依赖积分路径, 而不是一正规函数，换句话说

$$\boldsymbol{A}\neq\nabla f$$

其中，f 是空间坐标的函数。对于我们的局域磁通情况，在流形 M 上，矢量势在平面极坐标中是

$$\boldsymbol{A}=\frac{\varPhi}{2\pi\rho}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{2.3.17}$$

形式解变为

$$\psi=\psi_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\int\mathrm{d}\varphi} \tag{2.3.18}$$

该相因子只有限制在固定的路径同伦类 (homotopy class) 内才有确定的值 (见 2.4 节)。我们再次看到，相因子是一个封闭的但非确定的微分一次式的积分，源于 Wess-Zumino 拓扑相互作用项，称为拓扑相因子。

2.3.4 AB 相位干涉：拓扑效应

我们用一理想实验来解释 AB 相位干涉，假设电子枪出来的电子可经路径 ψ_1 和 ψ_2 到达屏上的某点 (图 2.3.2)。

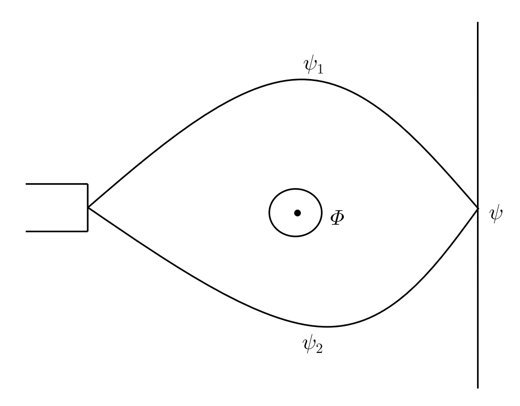


图 2.3.2 AB 相位干涉

到达屏上的波函数是 ψ_1 和 ψ_2 的线性叠加

$$\psi \sim \psi_1 + \psi_2 = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\int_1 \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}}\psi_1^0 + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\int_2 \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}}\psi_2^0 = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\int_1 \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}}(\psi_1^0 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\alpha}\psi_2^0) \quad (2.3.19)$$

其中, $\psi_{1,2}^0$ 表示无磁通时的波函数。到达屏上的电子概率是

$$|\psi|^2 = |\psi_1^0|^2 + |\psi_2^0|^2 + \psi_1^{0*}\psi_2^0\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\alpha} + \psi_1^0\psi_2^{0*}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\alpha} \quad (2.3.20)$$

AB 相位干涉的第一个实验发表于 20 世纪 60 年代，但有漏磁场存在的争议。日本日立公司 Tonomura 发展了电子波干涉技术，用超导体屏蔽了磁通，无争议地实现了 AB 相位干涉实验。图 2.3.3 是其实验装置原理图和干涉条纹的激光全息照片, 电子枪射出的电子被分成相干的两束, 分别从包含磁通的超导环的内和外两边通过, 并使其干涉。由于超导体内磁通是量子化的, 磁通量子单位是

$$\Phi_0^* = \frac{ch}{e^*}$$

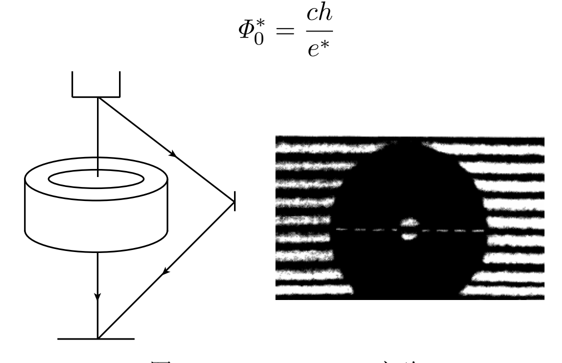


图 2.3.3 Tonomura 实验

其中, 超导粒子电荷是二倍电子电荷 $e^* = 2e$。通过磁环内外的电子波干涉条纹有半个位移，说明环内的磁通是奇数个 Φ_0^*，相当于 $\alpha = 1/2$。

2.3.5 Josephson 效应——标量势 AB 相位

在超导环路中加一绝缘薄层称为 Josephson 隧道结，即使外加直流电压远低于绝缘薄层的击穿阈值, 仍可有电流通过且电流随时间往复振荡, 称为 Josephson 效应。我们给出一简单的理论分析，旨在说明，Josephson 效应实质上是标量势 AB 相位产生的宏观量子效应。假设隧道结是一厚度为 $2a$ 的势垒，如图 2.3.4 所示，其两边的超导态序参数 (宏观波函数) 是复标量场, 其一般形式可写为

$$\psi_1' = |\psi_1'|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1}, \quad \psi_2' = |\psi_2'|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2} \tag{2.3.21}$$

隧道结内是如图 2.3.4 所示的衰减波

$$\psi_1 \sim c_1\mathrm{e}^{-k(x+a)}, \quad \psi_2 \sim c_2\mathrm{e}^{-k(x-a)} \tag{2.3.22}$$

在 $\pm a$ 处连续性边界条件要求

$$c_1 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_1}, \quad c_2 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_2} \tag{2.3.23}$$

其中 $\theta_{1,2}$ 完全是由超导的复序参数 ψ' 引出的常数相位。结内的总波函数是

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \tag{2.3.24}$$

通过结的电流密度, 根据定义是

$$J = \frac{\mathrm{i}e^*\hbar}{2\mu^*}[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*] = J_0 \sin\theta \tag{2.3.25}$$

其中

$$\theta = \theta_1 - \theta_2 \tag{2.3.26}$$

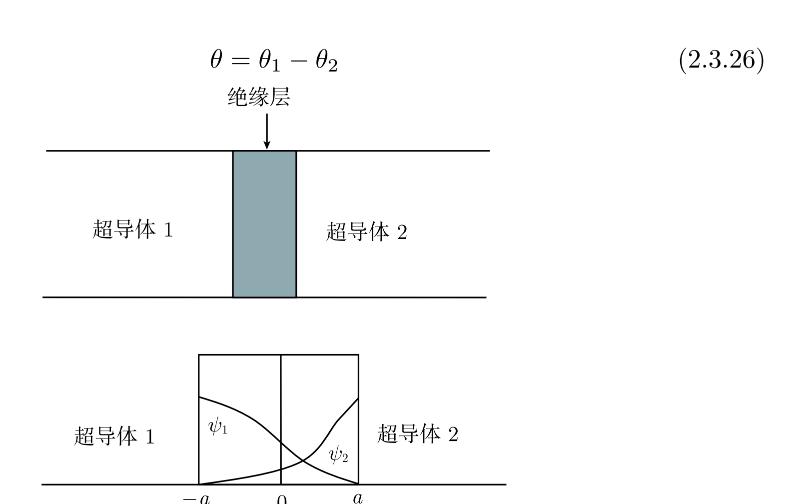


图 2.3.4 Josephson 效应

电流随相位差变化, 称为直流 Josephson 效应。

当加上直流电源时，超导粒子感受到一标量势, 而电场为零, 解含时 Schrödinger 方程，隧道结两边的序参数分别增加一标量势引起的含时相因子

$$e^{\mathrm{i}e^*\frac{V_{1,2}}{\hbar}t} \tag{2.3.27}$$

$V_{1,2}$ 是隧道结两边超导粒子感受到的标量势, 同样由 $\pm a$ 处连续性边界条件要求，隧道结中的衰减波附加一含时相位

$$\begin{aligned}\theta_1(t) &= \theta_1 + \frac{e^*V_1}{\hbar}t \\ \theta_2(t) &= \theta_2 + \frac{e^*V_2}{\hbar}t\end{aligned} \tag{2.3.28}$$

是标量势产生的相因子, 即标量势 AB 相因子, 而

$$V = V_1 - V_2$$

是环路中的直流偏压。通过结的电流密度则变为

$$J = J_0 \sin\theta(t) \tag{2.3.29}$$

由标量势产生的相位差是

$$\theta(t) = \theta_1(t) - \theta_2(t) = \theta + \frac{e^*V}{\hbar}t \tag{2.3.30}$$

电流振荡频率是

$$\omega = \frac{e^*V}{\hbar} \tag{2.3.31}$$

称为交流 Josephson 效应。

2.3.6 超导量子干涉仪原理——AB 拓扑相位干涉

利用 Josephson 效应可以做成超导量子干涉仪，用以测量微弱磁场，图 2.3.5 为其示意图。

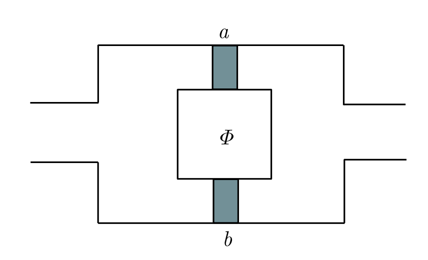


图 2.3.5 超导量子干涉仪原理图

环路上有两个 Josephson 结 a 和 b，有磁通穿过环路包围的空间时，a 和 b 隧道结的波函数相因子差分别变为

$$\theta \pm \pi\alpha$$

其中, $\alpha = \dfrac{\Phi}{\Phi_0}$, 而 $\Phi_0 = \dfrac{ch}{e^*}$ 是超导磁通量子单位，由于磁通存在，波函数多了一个 AB 相因子。通过仪器的总电流为通过 a,b 结的两电流之和：

$$J = J_a + J_b = J_0[\sin(\theta + \pi\alpha) + \sin(\theta - \pi\alpha)] = 2J_0 \sin\theta\cos(\pi\alpha) \tag{2.3.32}$$

超导量子干涉仪的原理是基于矢量势 AB 相位。因为电流是宏观观测量，这是一个宏观量子相干效应。

2.3.7 分数 (正则) 角动量和任意子

20 世纪 80 年代初，Wilczek 提出了一个极具创新意义的概念，即除整数自旋 Bose 子、半整数自旋 Fermi 子外，还可存在任意自旋粒子，称之为任意子。任意子角动量是介于整数和半整数之间的任意分数。三维以上空间，角动量本征值只能取整数或半整数，这完全由角动量算符的对易关系，或者 $SU(2)$ 群不可约表示确定，但二维空间角动量算符只有一个分量，不能对本征值有任何限制，量子化的角动量本征值谱可平移一任意常数。事实上，只有在二维多连通空间，分数角动量才有可能。我们已看到，带电粒子和磁通复合系统的角动量依赖磁通，可以是任意值。但非整数角动量谱可以是正则和力学角动量两种情况。磁通依赖的力学角动量

$$l_z^k = (m-\alpha)\hbar$$

没任何奇异之处，如前所述，其力学原因有明确的经典解释。波函数是周期的，在 2π 旋转下不变，而正则角动量谱是整数，

$$l_z^c = m\hbar \tag{2.3.33}$$

1. 定轴转动幺正算符

在量子力学中，正则角动量算符才是空间旋转生成算符。考虑绕 $\boldsymbol{n}$ 轴的转动

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}) &= \psi(\boldsymbol{x})+\Delta\boldsymbol{x}\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{x}) = (1+\Delta\boldsymbol{x}\cdot\nabla)\psi(\boldsymbol{x}) = \left(1+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta\boldsymbol{x}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)\psi(\boldsymbol{x}) \\ &= \left(1+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta\varphi(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)\psi(\boldsymbol{x}) = \left(1+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta\varphi\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{x}\times\hat{\boldsymbol{p}})\right)\psi(\boldsymbol{x}) \\ &= \left(1+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta\varphi\boldsymbol{n}\cdot\hat{L}\right)\psi(\boldsymbol{x})\end{aligned} \tag{2.3.34}$$

其中使用了等式 (图 2.3.6)

$$\Delta\boldsymbol{x} = \Delta\varphi\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{x}$$

有限转动

$$\varphi = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \Delta\varphi\to 0}} N\Delta\varphi$$

幺正算符是

$$\hat{U}(\varphi) = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \Delta\varphi\to 0}} \prod_{i=1}^{N}\left(1+\frac{i}{\hbar}\Delta\varphi\boldsymbol{n}\cdot\hat{L}\right) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varphi\boldsymbol{n}\cdot\hat{L}} \tag{2.3.35}$$

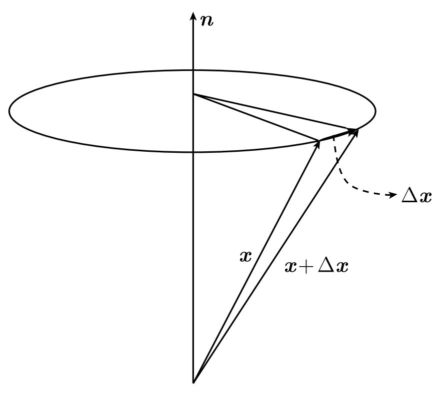


图 2.3.6　绕 $\boldsymbol{n}$ 轴的转动

2. 任意子波函数及空间旋转特性

在平面极坐标中，ψ_0 满足的 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_0 = E\psi_0 \tag{2.3.36}$$

变为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\psi_0 = E\psi_0 \tag{2.3.37}$$

角动量本征态是

$$\psi_0^{(m)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}R_m(r)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \tag{2.3.38}$$

分数角动量只能针对于正则角动量而言，为此，我们考查前面讨论过的 AB 相位态

$$\psi_{\mathrm{AB}}^{(m)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}R_m(r)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\int\mathrm{d}\varphi} \tag{2.3.39}$$

其角度部分不是函数，因为相因子不可积，但它是正则角动量算符的本征态，因为联络微分一次式 (参看第 1 章的定义)

$$\omega = \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l} = \frac{\alpha\Phi_0}{2\pi}\mathrm{d}\varphi$$

是封闭的, 即微分二次式为零 (无电磁场)

$$\mathrm{d}\omega = 0$$

但不是确定的，即它不能表示为一函数的微分

$$\omega \neq \mathrm{d}f$$

其中 f 表示一正规函数，换句话说, 联络微分一次式没有确定的积分。事实上

$$\hat{L}_z\psi_{\mathrm{AB}}^{(m)}=(m+\alpha)\hbar\psi_{\mathrm{AB}}^{(m)} \tag{2.3.40}$$

正则角动量谱是

$$l_z^c=(m+\alpha)\hbar \tag{2.3.41}$$

AB 相位态在空间旋转 2π 时变为

$$\hat{U}(2\pi)\psi_{\mathrm{AB}}^{(m)}=\psi_{\mathrm{AB}}^{(m)}(\varphi+2\pi)=\psi_{\mathrm{AB}}^{(m)}(\varphi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\alpha} \tag{2.3.42}$$

若 $\alpha=$ 整数，AB 相位态在 2π 转动下不变号，是 Bose 子；若 $\alpha=$ 半整数，AB 相位态在 2π 转动下变号，是 Fermi 子；其他任意值情况，即 Wilczek 任意子。

关于 AB 相位态的说明：

AB 相位态只在二维多连通空间 —— 拓扑流形上有意义, 因为 Hilbert 空间的所有态有共同的拓扑相因子, 虽然它不是 2π 旋转不变的, 但不会影响本征态的正交规一，而任意态的几率密度仍然是 2π 周期函数。

2.4　多连通空间量子力学，纤维丛，AB 相位的几何意义

2.4.1　多连通空间的基本群，纤维丛

我们已指出 AB 相位态不是定义在通常实空间 $\mathbf{R}^2$ 的函数，而只在称为纤维丛的空间才有定义。和单连通空间不同，多连通空间 M 中的路径不是全部等价的，而存在路径同伦类 (homotopy class)，在同一类中的路径才是等价的。例如图 2.4.1 所示的对于参考点为 O 的闭合路径，可用 $\{0\}$ 表示所有不环绕 Δ 的路径集合，用 $\{1\}$ 表示所有逆时针环绕 Δ 一次的路径，$\{-1\}$ 代表所有顺时针环绕 Δ 一次的路径，以此类推，$\{n\}$ 表示所有逆时针环绕 n 次的路径，而 $\{-n\}$ 表示所有顺时针环绕 n 次的路径。$\{0\},\{1\},\{-1\},\cdots$ 表示路径的同伦类，不属于同一类的路径不等价。显然，同伦类有群结构，称为多连通空间的基本群 $\pi_1(M)$。$\{0\}$, $\{1\}$, $\{-1\}$, $\cdots$ 是这个基本群 $\pi_1(M)$ 的元素，群表示是整数集合 $\mathbf{Z}$。

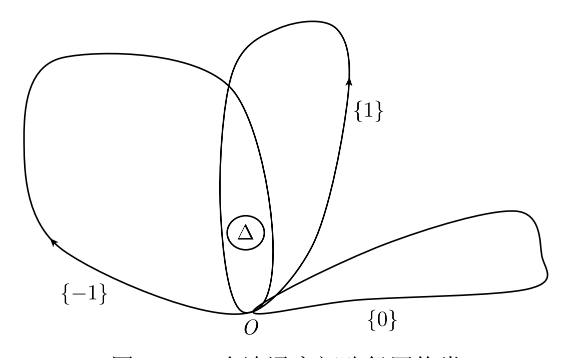


图 2.4.1　多连通空间路径同伦类

流形 M 称为基空间 (是一个拓扑流形)，而基本群 $\pi_1(M)$(也是一个拓扑空间) 则是定义在 M 上每点的丛空间，存在由 $\pi_1(M)$ 到 M 的映射，M 和 $\pi_1(M)$ 组成的复合空间称为纤维丛, 记为 $\tilde{M}$，它是 M 的全覆盖空间 (universal covering space)，是一单连通空间。我们已经看到，在多连通空间 M 上可存在一非通常函数的态即 AB 相位态 (或者 Dirac 不可积相因子态), 它不是 M 上的函数，但在纤维丛 $\tilde{M}$ (坐标为 $[q,n]$, 其中 q 是基空间点，而 n 是丛上的坐标) 上有确定的值，即只有给出积分的端点和路径同伦类数，相因子才能完全确定，换句话说, 它是纤维丛上的函数。AB 相位干涉则是不同伦类上的路径相位干涉。

2.4.2 拓扑相因子的几何意义

我们来解释拓扑相因子的几何意义, 为此, 假设在多连通空间 M 每一点 q 上都连接一个定轴转动群

$$S^1 = \{z \in \mathbf{C} : |\boldsymbol{z}| = 1\}$$

$\mathbf{C}$ 表示复数平面。其生成元是 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} \in S^1(0 \leqslant \theta < 2\pi)$，则复合空间 $\bar{M} = M \times S^1$ 是 M 上的 $U(1)$ 纤维丛。如果定义在 $\bar{M}$ 上的波函数满足

$$\Psi(q\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}) = \Psi(q)\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}$$

(n 是整数) 则 Ψ 是 M 上的函数。不满足上述条件的话，多连通空间就是扭曲的 (twisted). 局域磁通引出的荷电粒子 Wess-Zummino 项使多连通空间扭曲，是 AB 相位态的几何意义。从作业 2.2 的结果可看出, 空间扭曲是由运动的荷电粒子电场和磁通相互作用产生的。

二维平面 $\mathbf{R}^2$ 上若有 N 个粒子，不允许任何两个粒子占据同一空间位置。组态空间为有 N 个洞的二维平面记为

$$M = \mathrm{R}^2/X_1 \cdots X_N$$

其中, X_1 是第 i 个粒子的位置。有 N 个洞的二维多连通空间基本群是辫子群

$$\pi_1(M) = B_N$$

它给出任意子统计。

2.5 奇异规范变换和 Dirac 磁单极

2.5.1 Dirac 磁单极

当磁通量为整数个量子单位时，$\alpha = n$, 多连通空间扭曲消除，AB 相位态变成 M 上的函数

$$\Psi_{\mathrm{AB}} = \Psi_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\varphi} \tag{2.5.1}$$

这时，量子化磁通不引起任何量子观察效应。而 Ψ_{AB} 和 Ψ_0 之间可看作是一规范变换，但是规范函数存在奇点，故称为奇异规范变换。如果把两磁极拉开无限远，而连接两磁极的奇异磁通线是量子化的，Dirac 认为可实现磁单极，因为奇异线无观测效应。设磁单极的磁荷为 g, 在以磁单极 (我们这里选为磁北极) 为坐标原点的球坐标系中，单极的磁场是

$$\boldsymbol{B}=\frac{g\boldsymbol{e}_r}{r^2} \tag{2.5.2}$$

其中, $\boldsymbol{e}_r$ 是径向单位矢量，r 是单级到空间观测点的距离，θ 和 φ 分别是极角和纬度角，$\boldsymbol{e}_\theta$ 和 $\boldsymbol{e}_\varphi$ 是相应的单位矢量。磁荷的 Gauss 定理为

$$\oiint \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}=4\pi g$$

矢量势是

$$\boldsymbol{A}=g\frac{\sin\theta}{r(1+\cos\theta)}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{2.5.3}$$

显然, “$-z$” 轴是奇异线，即磁通线的位置。总磁通

$$\varPhi=n\varPhi_0=4\pi g$$

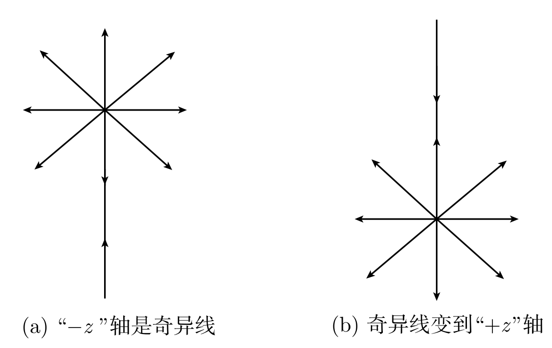
因而有

$$eg=n\frac{\hbar c}{2} \tag{2.5.4}$$

这正是 Dirac 量子化条件。只要有一个磁单极存在, 电荷就必然是量子化的, Dirac 引入磁单极的目的是为理解和解释电荷量子化。磁通线的位置可通过奇异规范变换随意改动，如用奇异规范变换

$$\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}-\frac{2g}{r\sin\theta}\boldsymbol{e}_\varphi=-\frac{g(1+\cos\theta)}{r\sin\theta}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{2.5.5}$$

可把奇异线从 “$-z$” 轴变到 “$+z$” 轴，如图 2.5.1 所示。



(a) “$-z$”轴是奇异线　　(b) 奇异线变到“$+z$”轴

图 2.5.1　磁单级, 奇异线分别是 “$\pm z$” 轴

2.5.2　吴–杨无奇异的磁单极理论

我们看到，Dirac 磁单极理论中存在奇异线，为克服此缺点, 吴–杨发展了一无奇点的单极理论。带电粒子不允许占据磁单极位置, 因而组态空间是一拓扑流形 (topological manifold)

$$M = R^3 - \{0\} \sim S^2$$

它和拓扑流形 S^2 拓扑等价，存在两个开区域

$$M_+ = S^2 - \{S_p\} \sim R^2$$

和

$$M_- = S^2 - \{N_p\} \sim R^2$$

分别是除去南北极的球面 (这里 S_p 和 N_p 分别表示南北极点), 它们都和 R^2 拓扑等价。考虑切点分别位于南北极的切平面, 如图 2.5.2 所示，连接北极和球面上一点 a 的直线和南极切平面的交点 a', 是球面上的点 a 在该切平面上的投影，显然投影是一一对应的，除北极外，所有球面上的点都可投影到南极切平面上，类似地，除南极外球面上的点也都可投影到北极切平面上。所以, 拓扑流形 S^2 至少需要两个平庸拓扑空间 M_+ 和 M_- 覆盖。

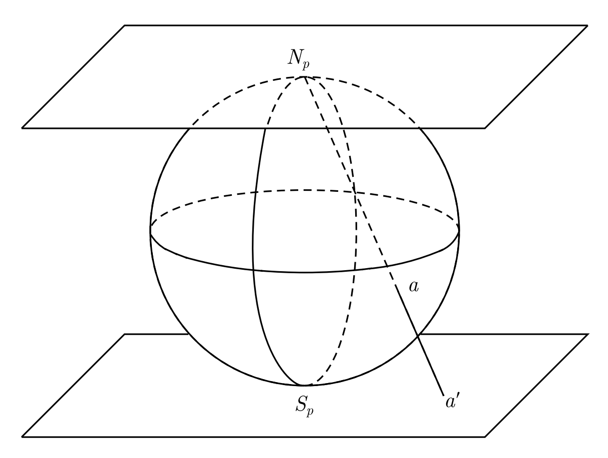


图 2.5.2　拓扑流形 S^2 到 R^2 的球极平面投影 (stereographic projection)

在空间 M_+ 我们可用矢势

$$\boldsymbol{A}_+ = g\frac{\sin\theta}{r(1+\cos\theta)}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{2.5.6}$$

它在 M_+ 上无奇异线。而在空间 M_- 矢势为

$$\boldsymbol{A}_- = -g\frac{\sin\theta}{r(1+\cos\theta)}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{2.5.7}$$

它在 M_- 上无奇异线。

我们可分别在 M_+ 和 M_- 空间做量子力学计算, Schrödinger 方程是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_\pm}{\partial t}=\hat{H}_\pm\psi_\pm \tag{2.5.8}$$

其中

$$\hat{H}_\pm=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}_\pm\right)^2 \tag{2.5.9}$$

两规范势之间存在变换

$$\boldsymbol{A}_+=\boldsymbol{A}_-+\frac{2g}{r\sin\theta}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{2.5.10}$$

波函数间的变换是

$$\psi_+=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{4\pi g}{\Phi_0}\varphi}\psi_- \tag{2.5.11}$$

由 Dirac 量子化条件

$$\frac{4\pi g}{\Phi_0}=n \tag{2.5.12}$$

因而 ψ_+，ψ_- 之间只差一奇异规范变换。

2.5.3 Dirac 量子化条件的几何意义

两区域 M_+ 和 M_- 波函数间的规范变换定义了由交叠区域

$$S^1=M_+\cap M_-$$

到规范群 $U(1)$ 间的映射, 因为

$$U(1)\sim S^1$$

也即由 S^1 到 S^1 的映射，它可按空间 S^1 的第一同伦群 (first homotopy group) 即基本群

$$\pi_1(U(1))\sim Z \tag{2.5.13}$$

分类, 称为 $U(1)$ 丛的第一陈类 (first Chern class), 记为 c_1。Dirac 量子化条件方程 (2.5.12) 中的整数

$$n\in Z$$

可被解释为 $\pi(U(1))$ 的群元, 即绕数 (winding number), 或者陈数，是一拓扑不变量 (topological invariant) 也称为拓扑荷。

2.6 带电粒子被磁通线的散射

在 Aharonov 和 Bohm 的著名文章 (1959) 中，大半的篇幅是用以计算带电粒子被无限长磁通线的散射，这篇文章是二维长程势散射的经典文献，给出了该问题的正确理论分析和计算。微分散射截面的推导并不困难，关键是得到正确的散射边条件。

2.6.1 精确解和微分散射截面

在以磁通线位置为坐标原点的平面极坐标系中, 定态 Schrödinger 方程是

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\partial}{r\partial r}+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial \varphi}-\mathrm{i}\alpha\right)^2+k^2\right]\psi=0 \tag{2.6.1}$$

其中

$$k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

表示入射粒子的波矢, E 是动能。

1. 精确解

极限情况下，线磁通半径为零，在坐标原点和 $r\to\infty$ 波函数均有限的通解是

$$\psi=\sum_{m=-\infty}^{\infty}a_m J_{|m-\alpha|}(kr)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \tag{2.6.2}$$

其中

$$J_{|m-\alpha|}(kr)$$

是 Bessel 函数, 系数 a_m 由散射边条件确定。

2. 入射边条件和微分散射截面

假定入射粒子沿 x 轴反方向入射, 因而入射波函数 ψ_i 的几率流密度

$$\boldsymbol{j}=\frac{\mathrm{i}\hbar(\psi_{\mathrm{i}}\nabla\psi_{\mathrm{i}}^*-\psi_{\mathrm{i}}^*\nabla\psi_{\mathrm{i}})}{2m}-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\psi_{\mathrm{i}}\psi_{\mathrm{i}}^* \tag{2.6.3}$$

必须沿 $-x$ 方向。满足这一条件的入射波只能是

$$\psi_{\mathrm{i}}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kx-\alpha\varphi)} \tag{2.6.4}$$

这正是前面提到的 AB 相位态，在该态上, 入射粒子力学角动量的期待值为零, 不受磁通影响, 物理意义非常明确。因而通解中的常系数可确定为

$$a_m=(-\mathrm{i})^{|m+\alpha|} \tag{2.6.5}$$

把波函数分为三部分

$$\psi=\psi_1+\psi_2+\psi_3 \tag{2.6.6}$$

$$\psi_1=\sum_{m=1}^{\infty}(-\mathrm{i})^{m+\alpha}J_{m+\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$$

$$\psi_2=\sum_{m=-\infty}^{-1}(-\mathrm{i})^{m+\alpha}J_{m+\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}=\sum_{m=1}^{\infty}(-\mathrm{i})^{m-\alpha}J_{m-\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}$$

$$\psi_3 = (-\mathrm{i})^{|\alpha|} J_{|\alpha|}$$

分别计算三部分波函数的求和, 利用 Bessel 函数在 $r \to \infty$ 的渐近形式, 则可得到精确解的渐近表达式为

$$\psi \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha\varphi - kr\cos\varphi)} - \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{\sqrt{2\pi\mathrm{i}kr}} \sin\pi\alpha \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}}{\cos\dfrac{\varphi}{2}} \tag{2.6.7}$$

微分散射截面因而是

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\varphi} = \frac{\sin^2\pi\alpha}{2\pi\cos^2\left(\dfrac{\varphi}{2}\right)} \tag{2.6.8}$$

本节的计算基本摘录自 Aharonov 和 Bohm 的文章 (Phys. Rev., 115：485), 其推导严谨优美, 令人叹为观止。显然, 散射是动力学效应，入射波力学角动量期待值为零，散射波则和磁通有关，力学角动量的变化是磁通作用的结果。

2.6.2 分波相移和长程势的散射边条件

精确解 (2.6.2) 中, m 次分波在 $r \to \infty$ 的散射边条件是

$$\lim_{r\to\infty} a_m J_{|m-\alpha|}(kr) \sim (-\mathrm{i})^m J_m(kr) + f_m \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{\sqrt{r}} \tag{2.6.9}$$

其中 f_m 是分波散射振幅。用 Bessel 函数的渐进表达式不难得到

$$a_m = (-\mathrm{i})^{|m+\alpha|-1} \tag{2.6.10}$$

分波散射振幅是

$$f_m(k,\alpha) = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi k}} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\pi}{4}} [\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_m(\alpha)} - 1] \tag{2.6.11}$$

计算得到的分波相移为

$$\delta_m(\alpha) = \frac{\pi}{2}(|m| - |m+\alpha|) = \begin{cases} \dfrac{-\pi\alpha}{2}, & m \geqslant 0 \\ \dfrac{\pi\alpha}{2}, & m < 0 \end{cases} \tag{2.6.12}$$

总散射振幅是分波振幅之和

$$f(k,\alpha,\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_m \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}} \sin\pi\alpha}{\sqrt{2\pi k}\cos\dfrac{\varphi}{2}} \tag{2.6.13}$$

总微分散射截面

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\varphi} = |f|^2 \tag{2.6.14}$$

和 AB 文章中得到的结果完全一样。不同点是入射波，Aharonov 和 Bohm 文章中的入射波方程 (2.6.4) 不是平面波，但几率流沿 x 轴方向。从分波的渐近表达式方程 (2.6.9) 和平面波的 Bessel 函数展开式，不难得到分波相移方法中的入射波就是平面波

$$\sum_{-\infty}^{\infty}(-\mathrm{i})^m J_m(kr) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr\cos\varphi} \tag{2.6.15}$$

因为存在磁通规范场，该入射平面波对应的入射几率流或者入射粒子速度则不可能再沿 x 轴方向。另外, 由于磁通规范场是长程势，在 $r\to\infty$ 区域，平面波不是方程的渐近解，但 Aharonov 和 Bohm 文章中的入射波是方程的渐近解，因而才是正确的散射边条件。为克服入射平面波的困难, 下面一节的计算中采取了人为的长程势截断。

作业 2.3 求有长程势 $\boldsymbol{A}$ 存在时入射平面波 (2.6.15) 的几率流密度和粒子力学角动量期待值。

作业 2.4 验证平面波 (2.6.15) 不可能是 Schrödinger 方程 (2.6.1) 的渐近 $(r\to\infty)$ 解, 但 AB 入射波 (2.6.4) 是解。

2.6.3 长程势的截断和返回磁通

为克服长程势入射平面波不适用的困难, 可人为在半径 $r=R$ 处截断矢量势, 令

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A} &= \frac{\varPhi}{2\pi r}\boldsymbol{e}_\varphi, \quad 0<r\leqslant R\\ \boldsymbol{A} &= 0, \quad r>R\end{aligned} \tag{2.6.16}$$

这一截断的物理意义是, 存在一个和原磁通大小相等方向相反而均匀分布在半径为 R 的圆柱面上的返回磁通。在 $r>R$ 的区域，长程势被屏蔽 ($\boldsymbol{A}=0$) 是自由粒子方程, 当然可用入射波是平面波的散射边条件, 分别得到 $r>R$ 和 $r<R$ 两区域 Schrödinger 方程的解, 注意到 $r=R$ 的连续性边条件, 用和上节中同样的分波相移方法，可得到以 R 为参数的分波散射振幅和微分散射截面。有兴趣的读者可参阅本章的文献，推导细节不在此赘述。十分有趣的是，当取 $R\to\infty$ 极限时, 分波散射振幅和微分散射截面都退化到和 AB 文章完全一样的结果。由于返回磁通的存在，在这种情况下, 粒子受到了返回磁场 Lorentz 力作用。

2.7 介观环输运电流的相干振荡

当系统 (电子系统) 的尺度比退相干长度还小时，可发现与载流子量子相位相干性有关的新奇现象，从而使物理观测量 (宏观量) 呈现出显著的量子力学效应，

现称其为介观系统，指尺度介于微观和宏观之间，量子效应显著，但仍有确定的宏观观测量的系统。这一微小系统的特性和应用研究已发展成一个学科分支：介观物理。其中量子态相位干涉起着关键作用，而, 通过介观金属环输运电流的 AB 振荡研究开启了介观物理研究的先河。

2.7.1 一维量子波导理论

量子力学中, 导线是一理想化的极限情况，当其纵向长度远大于横向尺度，以至于在低温下电子的横向运动被忽略时，电子纵向运动满足自由粒子Schrödinger方程。在任一标记为 “j” 的分支电路中波函数是两反向传播平面波的线性叠加

$$\psi_j(x) = a_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + b_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{2.7.1}$$

x 表示沿导线方向的坐标，k 是波矢。在电路的节点处存在几何散射，各分支电路波函数满足边条件

$$\psi_1 = \psi_2 = \cdots = \psi_N \tag{2.7.2}$$

和

$$\sum_j \frac{\mathrm{d}\psi_j(x_{c_j})}{\mathrm{d}x} = 0 \tag{2.7.3}$$

x_{c_j} 是节点坐标，第二个节点边条件保证了流守恒。

2.7.2 AB 介观环电荷输运传输矩阵

考虑周长为 L 的 AB 介观环，一磁通

$$\varPhi = \alpha \varPhi_0$$

穿过介观环的中心，$\varPhi_0$ 是磁通的量子单位。入射和出射导线把环分为上下对称的两半，如图 2.7.1 所示。

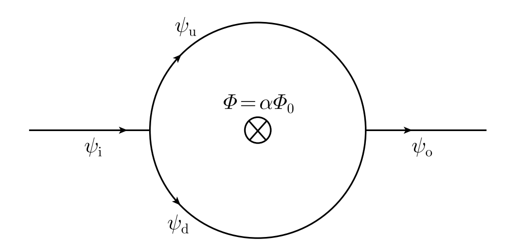


图 2.7.1 AB 介观环输运示意图

$$\psi_\mathrm{i} = a_\mathrm{i} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + b_\mathrm{i} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$\psi_\mathrm{o} = a_\mathrm{o} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + b_\mathrm{o} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

分别表示入射和出射导线上的波函数。用同样的标记, 上下半环上的波函数表示为 $\psi_{\rm u}$ 和 $\psi_{\rm d}$。把入射导线和环的节点选为局域坐标原点，边条件是

$$a_{\rm i}+b_{\rm i}=a_{\rm u}+b_{\rm u}=a_{\rm d}+b_{\rm d} \tag{2.7.4}$$

$$k(a_{\rm i}-b_{\rm i})+k_{\rm u}(a_{\rm u}-b_{\rm u})+k_{\rm d}(a_{\rm d}-b_{\rm d})=0 \tag{2.7.5}$$

由于磁通存在，圆环上波函数的相位增加一个不可积相因子，即正则角动量有一个平移，假定磁场方向指向纸面由外向内 (图 2.7.1), 则上下半环的波矢变为

$$k_{\rm u}=k+\frac{2\pi}{L}\alpha$$

$$k_{\rm d}=k-\frac{2\pi}{L}\alpha$$

在出射导线和环的节点 $\left(\text{局域坐标 }\dfrac{L}{2}\right)$ 处边条件是

$$a_{\rm u}{\rm e}^{{\rm i}\frac{k_{\rm u}L}{2}}+b_{\rm u}{\rm e}^{-{\rm i}\frac{k_{\rm u}L}{2}}=a_{\rm d}{\rm e}^{{\rm i}\frac{k_{\rm d}L}{2}}+b_{\rm d}{\rm e}^{-{\rm i}\frac{k_{\rm d}L}{2}}=a_{\rm o}{\rm e}^{{\rm i}\frac{kL}{2}}+b_{\rm o}{\rm e}^{-{\rm i}\frac{kL}{2}} \tag{2.7.6}$$

和

$$k_{\rm u}(a_{\rm u}{\rm e}^{{\rm i}\frac{k_{\rm u}L}{2}}-b_{\rm u}{\rm e}^{{\rm i}\frac{k_{\rm u}L}{2}})+k_{\rm d}(a_{\rm d}{\rm e}^{{\rm i}\frac{k_{\rm d}L}{2}}-b_{\rm d}{\rm e}^{{\rm i}\frac{k_{\rm d}L}{2}})+k_{\rm o}(a_{\rm o}{\rm e}^{{\rm i}\frac{kL}{2}}-b_{\rm o}{\rm e}^{{\rm i}\frac{kL}{2}})=0 \tag{2.7.7}$$

由节点边条件方程解出波函数振幅 $a_{\rm u},b_{\rm u},a_{\rm d},b_{\rm d}$, 则可得到连接出入波振幅的传输矩阵 T

$$\begin{pmatrix} a_{\rm i}\\ b_{\rm i}\end{pmatrix}=T\begin{pmatrix} a_{\rm o}\\ b_{\rm o}\end{pmatrix} \tag{2.7.8}$$

物理观测量，如传输电导，则可用 Landauer-Büttiker 公式由传输矩阵求得。介观物理不同于微观系统的是可直接得到宏观观测量，也不同于大尺度宏观体系，这里波函数相位相干有明显效应。

参 考 文 献

Aharonov Y, Au C K, Lerner E C, Liang J Q. 1984. Aharonov-Bohm effect as a scattering event. Phys. Rev., D29: 2396

Aharonov Y, Au C K, Lerner E C, Liang J Q. 1984. Consistency of the Aharonov-Bohm effect with quantum theory. Lett. Nuovo Cimento, 39: 145

Aharonov Y, Bohm D. 1959. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. Phys. Rev., 115: 485

Balachandran A P, Marmo G, Skagerstam B S. et al. 1983. Gauge Symmetries and Fibre Bundles. Berlin: Springer

Buttiker M. 1986. Four-terminal phase-coherent conductance. Phys. Rev. Lett., 57: 1761; 1988. IBM J. Res, Dev., 32: 317

Chambers R G. 1960. Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux. Phys. Rev. Lett., 5: 3

Chen G, Xue Z Y, Wei L F, Liang J Q. 2009. Interaction-induced topological quantum interference in an extended Dicke model. Europhysics Letters, 86: 44002

Dirac P A M. 1931. Quantised singularities in the electromagnetic field. Proc. R. Soc., A133: 60

Jackiw R, Redilch A N. 1982. Two-dimensional angular momentum in the presence of long-range magnetic flux. Phys. Rev. Lett., 50: 555

Kobe D H, Liang J Q. 1986. Noconservation of angular momentum in Aharonov-Bohm Scattering. Phys. Lett., A118: 475

Kobe D H, Liang J Q. 1988. Scattering from a magnetic flux line due to the Lorentz force of the return flux. Phys. Rev., A37: 1133

Laudauer R. 1957. Spatial variation of currents and fields, due to localized scatterers in metallic conduction. IBM J. Res. Dev., 1: 223

Liang J Q. 1984. Analysis of the experiment to determine the spectrum of the angular momentum of a charged-boson, magnetic-flux-tube composite and the aharonov-bohm effect. Phys. Rev. Lett., 53: 859; 53: 1509

Liang J Q. 1985. Does the return flux result in the Aharonov-Bohm scattering amplitude? Phys. Rev., D32: 1014

Liang J Q, Ding X X. 1987. Aharonov-Bohm scattering from the hydrodynamical viewpoint. Phys. Lett., A119: 325

Liang J Q, Ding X X. 1987. Path integrals in multiply connected spaces and the fractional angular momentum quantization. Phys. Rev., A36: 4149

Liang J Q, Kulshreshtha D S. 1990. A charged particle in the magnetic field of a Dirac monopoleline. Phys. Lett., A149: 1

Liang J Q, Peng F, Ding X X. 1995. Persistent current induced by magnetic flux in a polyacetylene ring and Fröhlich superconductivity. Phys. Lett., A201: 369

Tonomura A, Osakabe N, Matsuda T, Kawasaki T. 1986. Evidence for aharonov-bohm effect with magnetic field completely shielded from electron wave. Phys. Rev. Lett., 56: 792

Wang J M, Wang R, Liang J Q. 2007. Quantum transport through two series Aharonov-Bohm interferometers with zero total magnetic flux. Chin. Phys., 16, No. 7

Wilczek F. 1982. Magnetic flux, angular momentum, and statistics. Phys. Rev. Lett. 48: 1144; 1982. Quantum Mechanics of Fractional-Spin Particles, 49: 937

Wu T T, Yang C N. 1975. Concept of nonintegrable phase factors and global formulation of gauge fields. Phys. Rev., D12: 2843

Yoseph Imry. 2002. Introduction to Mesoscopic Physics. Oxford University Press

Zhang Y P, Gao Y F, Liang J Q. 2005. Measurement induced dephasing and suppression of persistent current in a lattice ring. Phys. Lett., A346: 115

Zhang Y P, Yu H, Gao Y F, Liang J Q. 2005. Quantum transport through a double Aharonov-Bohm interferometer in a presence of Andreev reflection. Phys. Rev., B72: 205310

第 3 章　自旋-轨道耦合动力学, Aharonov-Casher 相位和非 Abel 规范场量子力学模型

非相对论量子力学中，自旋自由度是作为二分量矩阵直接引入的，没有经典力学对应。在外磁场中自旋的 Zeeman 能可引起能级劈裂，自旋–轨道相互作用产生能级超精细结构，是早已熟知的自旋效应。20 世纪 80 年代的一个新发现是自旋在外场中的拓扑相位，从对称性考虑，Aharonov 和 Casher 把 AB 效应中的无限长通电流螺线管压缩成一个点粒子磁矩，而把点电荷拉成一无限长电荷线，中性点粒子磁矩相对电荷线运动，也应有和矢势 AB 效应类似的效应，现称为 AC 效应。Aharonov 和 Casher 的论述中, 磁矩是被限制在固定方向，因而得到类似于 AB 效应中的等效 $U(1)$ 规范势。后来发展了中子物质波干涉技术，并用中子自旋在磁场中的 Zeeman 能实现标量势 AB 效应，而用自旋在电场中的等效矢势实现 AC 效应的实验观测。本书的理论分析中, 解除了对自旋方向的约束，考虑有普遍意义的自旋–轨道耦合动力学模型, 这样做的目的, 一方面是为了从理论上更正确地解释和理解用热中子做的 AC 和标势 AB 效应实验, 更为有意义的是, 在非相对量子力学中实现非 Abel 规范场 (non-Abelian gauge field) 和任意子物理模型，而 AC 效应只是自旋–轨道耦合动力学模型的一种特殊情况。非相对论量子力学中的非 Abel 规范场概念, 最初是由 Welczek 在把非简并态几何相位推广到简并态时引入的，之后，如何在凝聚态或光学系统中实现非 Abel 规范场, 受到了广泛关注。作为自旋电子学基础的自旋轨道耦合已成为近年来的研究热点，因为是相对论效应, 通常很弱, 在电子器件中无任何作用，但在重离子内电子速度显著增大, 耦合变强，特别是在某些半导体材料中, 自旋轨道耦合引起的效应受到了重视。本章中从自旋的经典动力学开始，解释轨道耦合的起源。为简化起见，我们从中性自旋粒子 (中子) 在电磁场中的经典动力学出发来研究这一有趣问题。荷电自旋粒子动力学只需把第 2 章的带电粒子在电磁场中的相互作用项加入即可。

3.1　中性自旋粒子在电磁场中的经典动力学

3.1.1　拉氏量和运动方程

在非相对论量子力学中, 自旋算符是直接在 Hamilton 算符中加入的, 没有经典对应，当然更自然的作法是取 Dirac 相对论方程的非相对论极限，得到 Pauli 方

程。我们为保持理论的一致性，先构造自旋的经典对应物理量和系统的拉氏量。本书关于自旋经典变量的引入虽然仅有形式逻辑意义，但可适用于任意自旋，更具普遍性，并给出明显的经典–量子对应。特别是非 Abel 规范场在这一理论框架下变成极其自然的结果。

假设一质量为 m 的自旋粒子，其经典自旋遵从约束关系 (注解)

$$\lambda^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 \tag{3.1.1}$$

其中, λ^2 是常数，表示总自旋的平方，是一守恒量，因而独立自旋自由度数是 2。一个很自然的假设是自旋分量满足和轨道角动量相同的 Poisson 括号，即

$$\{S_i, S_j\} = \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} S_k \tag{3.1.2}$$

其中, ε_{ijk} 为反对称张量。点粒子三维空间运动加上自旋, 总相空间是八维，而组态空间是

$$\mathbf{R}^3 \times \varGamma$$

其中

$$\varGamma = \{g\}$$

是转动群自旋 $\dfrac{1}{2}$ 表示，其生成元 g 是 $SU(2)$ 矩阵，可看作自旋组态空间 $\varGamma = \{g\}$ 中的 “坐标点”, 而点粒子空间位置张成三维实空间 $\mathbf{R}^3$。

$$g^\dagger g = g g^\dagger = 1, \quad \det g = 1 \tag{3.1.3}$$

g 和经典自旋变量 $\boldsymbol{S}$ 满足下面的关系式：

$$\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \lambda g \sigma_3 g^{-1} \tag{3.1.4}$$

其中

$$\sigma_i, \quad i = 1, 2, 3$$

是 Pauli 矩阵。非相对论中性自旋粒子在电磁场 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 中的拉氏量可写为

$$L = L_0 + L_{\mathrm{i}}$$

自旋和电磁场相互作用部分是

$$L_{\mathrm{i}} = \frac{\mu\lambda}{2c} \mathrm{Tr}[g\sigma_3 g^{-1} (\boldsymbol{E} \times \dot{\boldsymbol{r}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] + \frac{\mu\lambda}{2} \mathrm{Tr}[g\sigma_3 g^{-1} (\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\sigma})] \tag{3.1.5}$$

其中

$$L_0 = \frac{1}{2} m[\dot{\boldsymbol{r}}^2 + \mathrm{i}\lambda \mathrm{Tr}(\sigma_3 g^{-1} \dot{g})] \tag{3.1.6}$$

注解：本节的经典自旋动力学变量定义和拉氏量主要取材于文献 [5]。

是自由粒子拉氏量, μ 是自旋粒子的磁矩，Tr 表示求迹运算。方程 (3.1.5) 的两项事实上都是 Zeeman 能，第二项很显然，第一项中的 $\dfrac{1}{c}\boldsymbol{E}\times\dot{\boldsymbol{x}}$ 则是运动坐标系中粒子感受到的等效磁场，是相对论效应, 这是由外场引起的自旋–轨道耦合。很容易证明, 该拉氏量能给出正确的运动方程。对作用量

$$\mathcal{S}=\int L\mathrm{d}t$$

变分取极值 (最小作用量原理)

$$\delta\mathcal{S}=0$$

得到运动方程 (推导见 3.7 节)

$$m\ddot{\boldsymbol{r}}+\dot{\boldsymbol{p}}_i=\frac{\mu}{c}\nabla[\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{E}\times\dot{\boldsymbol{r}})]+\mu\nabla(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}) \tag{3.1.7}$$

其中

$$\boldsymbol{p}_i=\frac{\mu}{c}\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{E}$$

被称为自旋粒子的内禀动量, 自旋运动方程是

$$\dot{\boldsymbol{S}}=-\frac{\mu}{c}(\dot{\boldsymbol{r}}\times\boldsymbol{E})\times\boldsymbol{S}-\mu\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{S} \tag{3.1.8}$$

当无外场存在时, 空间是自由运动，自旋是守恒量，正是我们期待的结果

$$\ddot{\boldsymbol{r}}=0$$
$$\dot{\boldsymbol{S}}=0$$

把关系式方程 (3.1.4) 代入拉氏量方程 (3.1.5), 电磁场中的中性自旋粒子拉氏量变为

$$L=L_0+\frac{\mu}{c}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{E}\times\dot{\boldsymbol{r}})+\mu\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S} \tag{3.1.9}$$

形式上我们用了自旋的相空间变量，这里自旋变量应看作是组态空间“坐标”g 的函数。第二项可改写为

$$\frac{\mu}{c}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{E}\times\dot{\boldsymbol{r}})=\frac{\mu}{c}\dot{\boldsymbol{r}}\cdot(\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{E}) \tag{3.1.10}$$

等式右边变为和速度相关的等效矢量势相互作用能, 方程 (3.1.9) 的第三项则为等效标量势。

3.1.2 正则动量和 Hamilton 量

正则动量按定义是

$$\boldsymbol{p}=\frac{\partial L}{\partial\dot{\boldsymbol{r}}}=m\dot{\boldsymbol{r}}+\frac{\mu}{c}(\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{E}) \tag{3.1.11}$$

上式中, 第二项是等效矢量势引起的动量变化，从正则动量的定义式可以解出速度

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\boldsymbol{p} - \dfrac{\mu}{c}(\boldsymbol{S} \times \boldsymbol{E})}{m} \tag{3.1.12}$$

从而得到 Hamilton 量

$$H = \frac{\left[\boldsymbol{p} - \dfrac{\mu}{c}(\boldsymbol{S} \times \boldsymbol{E})\right]^2}{2m} - \mu \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{S} \tag{3.1.13}$$

显然, 中性自旋粒子在电磁场中有等效矢势

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{S} \times \boldsymbol{E}$$

和标量势

$$A_0 = \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B}$$

只要把 μ 看成 e, Hamilton 量形式上和带电粒子在电磁场中的运动一样, 证实了 AC 的对称性论述。量子化后, 自旋变量成为矩阵, 我们得到等效的非 Abel 规范场。

3.2 非 Abel 规范场

3.1 节中的自旋是经典矢量，我们现在考虑自旋 $\dfrac{1}{2}$ 粒子，量子化的自旋算符 (注解) 是

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

无外磁场的 Hamilton 算符则为

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\sum_1^3 D_i^2 \tag{3.2.1}$$

协变微商定义为

$$D_i = \frac{\partial}{\partial x_i} - \mathrm{i}qA_i \tag{3.2.2}$$

其中, $q = \dfrac{\mu}{2c}$。而

$$A_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk}\sigma_j E_k \tag{3.2.3}$$

则为矩阵矢势场, 即非 Abel 规范场，其等效“磁场”可由反对称张量计算

$$F_{i,j} = \frac{\mathrm{i}}{q}[D_i, D_j] = \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right) - \mathrm{i}q[A_i, A_j] \tag{3.2.4}$$

$i, j = 1, 2, 3$, 规范变换幺正算符可定义为

注解：本节中的符号 $\boldsymbol{S}$ 表示量子化自旋算符, 区别于前面的经典矢量。

$$U = \mathrm{e}^{\mathrm{i}q\sum_i f_i \sigma_i} \tag{3.2.5}$$

f 是空间坐标的函数, 在规范变换下, 协变微商算符变换是

$$D_i' = UD_iU^\dagger = \frac{\partial}{\partial x_i} - \mathrm{i}qA_i'$$

规范场变为

$$A_i' = UA_iU^\dagger - \frac{\mathrm{i}}{q}\left(\frac{\partial U}{\partial x_i}\right)U^\dagger \tag{3.2.6}$$

旋量波函数的变换是

$$\psi' = U\psi \tag{3.2.7}$$

定态 Schrödinger 方程是规范变换不变的。

选择电场可得到非 Abel 规范场的具体形式，如在下面 3.4 节考虑的 AC 效应模型中，无限长电荷线的电场在以电荷线为坐标原点的平面坐标系中是

$$\boldsymbol{E} = \frac{\rho(x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2)}{x_1^2 + x_2^2} \tag{3.2.8}$$

ρ 表示电荷线密度。非 Abel 规范场的明显表达式则为

$$A_1 = -\frac{\rho\sin\varphi}{r}\sigma_3 \tag{3.2.9}$$

$$A_2 = \frac{\rho\cos\varphi}{r}\sigma_3 \tag{3.2.10}$$

$$A_3 = \frac{\rho}{r}(\sin\varphi\sigma_1 + \cos\varphi\sigma_2) \tag{3.2.11}$$

$$r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$$

$$x_1 = r\cos\varphi, \quad x_2 = r\sin\varphi$$

当粒子自旋被约束于 “z” 方向时，$S_1 = S_2 = 0$，因而, $A_3 = 0$，矩阵规范势变为对角的，和 AB 磁通规范势场事实上相等。但对非受限的自旋动力学模型，当 $r > 0$ 时, 非 Abel 规范场的等效 “磁场” 由方程 (3.2.4) 计算，结果是

$$B_3 = 0 \tag{3.2.12}$$

$$B_2 = \frac{\rho}{r^2}\{(1-q\rho)\sin 2\varphi\sigma_1 + [(1-q\rho)\cos 2\varphi + q\rho]\sigma_2\} \tag{3.2.13}$$

$$B_1 = \frac{\rho}{r^2}\{[(1-q\rho)\cos 2\varphi - q\rho]\sigma_1 - (1-q\rho)\sin 2\varphi\sigma_2\} \tag{3.2.14}$$

3.3 脉冲磁场中的热中子经典动力学和标量势 AB 效应

20 世纪 80 年代末, 发展了中子物质波干涉技术，并用来验证 AC 效应和标量势 AB 效应，作为自旋动力学方程的应用例, 我们对实验作动力学分析。

3.3.1　经典动力学方程和 Larmor 进动

标量势 AB 干涉实验是把热中子束分成相干的两束，如图 3.3.1 所示，一个脉冲磁场作用在其中一束中子上，然后使两束中子干涉，中子计数器读出干涉结果。实验的目的是验证没有动力学效应的拓扑相位干涉, 即只有标量势引起的中子波函数相位改变, 是一个纯量子效应, 无经典对应。我们先从自旋的经典运动方程着手来分析这一有趣的问题，为确定起见, 假定空间均匀的脉冲磁场方向沿 z 轴，

$$\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$$

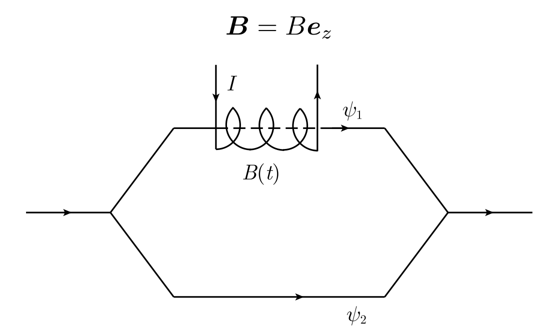


图 3.3.1　标量势中子干涉实验示意图

忽略磁场变化引起的感生电场作用, 因为电场和自旋相互作用

$$\frac{\mu}{c}\dot{\boldsymbol{r}} \cdot (\boldsymbol{S} \times \boldsymbol{E})$$

是相对论效应, 相对于

$$\mu \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{S}$$

是一小量。方程 (3.1.7) 和方程 (3.1.8) 表示的自旋粒子经典运动方程则变为

$$\ddot{\boldsymbol{r}} = 0 \tag{3.3.1}$$

和

$$\dot{S}_1 = \mu B S_2 \tag{3.3.2}$$

$$\dot{S}_2 = -\mu B S_1 \tag{3.3.3}$$

$$\dot{S}_3 = 0 \tag{3.3.4}$$

显然，空间是自由运动，自旋的 z 分量是守恒量。经典自旋方程的一般解是

$$S_1(t) = S_1(0)\cos\varOmega(t) + S_2(0)\sin\varOmega(t) \tag{3.3.5}$$

$$S_2(t) = S_2(0)\cos\varOmega(t) - S_1(0)\sin\varOmega(t) \tag{3.3.6}$$

$$S_3(t) = S_3(0) \tag{3.3.7}$$

自旋磁矩在外磁场中做 Larmor 进动，t 时刻的进动角是

$$\varOmega(t) = \int_0^t \omega_{\mathrm{L}}(t')\mathrm{d}t' \tag{3.3.8}$$

其中

$$\omega_{\mathrm{L}} = \mu B$$

是 Larmor 进动频率。

3.3.2 标量势 AB 效应

我们讨论标量势 AB 干涉实验这系统的量子力学解, 并用量子–经典对应原理分析解的物理意义。把外磁场方向选为 z 轴, 该系统的 Hamilton 算符是

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\hbar}{2}\omega_{\mathrm{L}}(t)\hat{\sigma}_3 \tag{3.3.9}$$

求解含时 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varPsi = \hat{H}\varPsi \tag{3.3.10}$$

选 $\hat{\sigma}_3$ 的本征态为基矢

$$\hat{\sigma}_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle, \tag{3.3.11}$$

显然, 含时 Schrödinger 方程的通解是

$$\varPsi(t) = \psi_0(\boldsymbol{r}, t)[c_+|+\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{1}{2}\int_0^t \omega_{\mathrm{L}}(t')\mathrm{d}t'} + c_-|-\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\int_0^t \omega_{\mathrm{L}}(t')\mathrm{d}t'}] \tag{3.3.12}$$

展开系数 $c_\pm$ 由中子的初始自旋极化确定。实验用的是热中子, 自旋无极化，对于热中子干涉, 文献中有三种理论分析方法:

方法一 中子极化沿磁场方向

相应的初条件是

$$c_+ = 1, \quad c_- = 0$$

假定脉冲时间为 T，有

$$\Omega = \int_0^T \omega_{\mathrm{L}}(t)\mathrm{d}t \tag{3.3.13}$$

通过磁场的中子波函数是

$$\varPsi_1 = \psi_0|+\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varOmega}{2}}$$

而无磁场作用的中子波函数为

$$\varPsi_2 = \psi_0|+\rangle$$

到达计数器上的中子波函数是

$$\varPsi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varPsi_1 + \varPsi_2) \tag{3.3.14}$$

计数器上的粒子数几率为

$$|\Psi|^2 = |\psi_0|^2\left(1+\cos\frac{\Omega}{2}\right) \tag{3.3.15}$$

显而易见, 极化态 $|-\rangle$ 给出相同的干涉结果。热中子干涉结果是两个自旋极化方向的统计平均，结果不变，因为沿磁场方向的中子自旋只有势能变化 (Zeeman 能) 而无动力学效应，基于这一理论分析，热中子干涉实验曾经被认为是无争议地验证了标量势 AB 效应, 即纯粹由势能产生的拓扑相位干涉。

方法二 中子极化方向和磁场垂直

上述的理论分析和对实验的解释, 立即受到质疑, 因为完全等价地也可选中子初始极化和磁场垂直, 如 σ_1 的本征态, 初条件则是

$$c_+ = c_- = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

通过脉冲磁场和无磁场作用的中子波函数分别变为

$$\Psi_1 = \psi_0\frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\Omega}{2}} + |-\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\Omega}{2}}]$$

和

$$\Psi_2 = \psi_0\frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle]$$

虽然计数器上的粒子数几率仍然不变, 和方程 (3.3.15) 一样，但物理解释却大相径庭。直接计算自旋在 Ψ_1 上的期待值, 不难验证，在这一初态选取下自旋绕磁场进动, 即熟知的 Larmor 进动, Ω 是进动角。热中子干涉只不过是验证了 Larmor 进动, 是一动力学效应，有经典对应。更为普遍的是下面的第三种自旋相干态的选取，采用自旋相干态，可得到明显的经典–量子对应。

3.3.3 自旋相干态，热中子干涉的动力学解释

热中子无极化，应该对各自旋极化方向求平均，自旋沿 z 方向两个态求平均绝非唯一的选择，如前面方法二中的论述就选了 x 或 y 方向的自旋本征态，这样一来, 就会发现自旋绕磁场方向进动，而不仅仅是只由标量势引起的效应。更一般性的选择, 应是自旋相干态，它是一宏观量子态，有确定的经典–量子对应。自旋相干态的定义为自旋在空间任意给定方向的最大自旋本征值态 (更严格的定义及其特性的论述见本书第 5 章)，对于自旋 $\frac{1}{2}$ 系统

$$\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}|\boldsymbol{n}_\pm\rangle = \pm|\boldsymbol{n}_\pm\rangle \tag{3.3.16}$$

$|\boldsymbol{n}_\pm\rangle$ 分别表示北、南极规范的自旋相干态, 其中

$$\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \tag{3.3.17}$$

是用方向角描述的单位矢量。北极规范的自旋相干态可由 $\hat{\sigma}_z$ 的本征态 $|+\rangle$ 通过空间旋转生成

$$|\boldsymbol{n}_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi/2}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi/2}|-\rangle \tag{3.3.18}$$

式 (3.3.18) 当然也可直接由求解本征方程 (3.3.16) 得到。

作业 3.1 解自旋相干态本征方程

$$\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}|\boldsymbol{n}_\pm\rangle = \pm|\boldsymbol{n}_\pm\rangle$$

求自旋相干态 $|\boldsymbol{n}_\pm\rangle$，其中 $|n_+\rangle$ 由方程 (3.3.18) 表示, 而

$$|n_-\rangle = \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}|+\rangle - \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}|-\rangle$$

通过脉冲磁场的自旋态显然是

$$|\boldsymbol{n}_+(\boldsymbol{B})\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\Omega}{2}}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\Omega}{2}}|-\rangle \tag{3.3.19}$$

到达计数器上的中子自旋态是

$$|\varPsi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\boldsymbol{n}_+\rangle + |\boldsymbol{n}_+(\boldsymbol{B})\rangle) \tag{3.3.20}$$

中子数几率为

$$I_{\boldsymbol{n}} = \langle\varPsi|\varPsi\rangle = 1 + \cos\left(\frac{\varOmega}{2}\right) \tag{3.3.21}$$

热中子总几率是 $I_{\boldsymbol{n}}$ 的空间平均值

$$I = \frac{1}{4\pi}\int I_{\boldsymbol{n}}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi = 1 + \cos\frac{\varOmega}{2} \tag{3.3.22}$$

结果和在 $\hat{\sigma}_z$ 的两本征态上求平均一样。但用自旋相干态得到的结论是 Larmor 进动角引起的干涉，完全是动力学效应, 而且有经典对应。下面我们证明在量子态 $|\boldsymbol{n}_+(\boldsymbol{B})\rangle$ 上的 Larmor 进动和经典方程完全一致。

作业 3.2 若两路径 (图 3.3.1) 上分别加大小相等、方向相反的脉冲磁场, 重复本节的讨论。

3.3.4 经典 – 量子对应，量子 Larmor 进动

根据经典–量子对应原理，在自旋相干态上 (宏观量子态) 力学量期待值的时间演化和经典动力学一致，为此，我们计算 Schrödinger 绘景中, 自旋算符在磁场驱动的含时自旋相干态上的期待值

$$\bar{\sigma} = \langle\boldsymbol{n}_+(\boldsymbol{B})|\hat{\sigma}|\boldsymbol{n}_+(\boldsymbol{B})\rangle$$

结果是

$$\bar{\sigma}_1 = \bar{\sigma}_1(0)\cos\Omega(t) + \bar{\sigma}_2(0)\sin\Omega(t) \tag{3.3.23}$$

$$\bar{\sigma}_2 = \bar{\sigma}_2(0)\cos\Omega(t) - \bar{\sigma}_1(0)\sin\Omega(t) \tag{3.3.24}$$

$$\bar{\sigma}_3 = \bar{\sigma}_3(0) \tag{3.3.25}$$

其中

$$\bar{\sigma}(0) = \langle \boldsymbol{n}_+|\hat{\sigma}|\boldsymbol{n}_+\rangle$$

表示在加磁场前自旋的初始值, 各分量的期待值分别是

$$\bar{\sigma}_1(0) = \sin\theta\cos\phi \tag{3.3.26}$$

$$\bar{\sigma}_2(0) = \sin\theta\sin\phi \tag{3.3.27}$$

$$\bar{\sigma}_3(0) = \cos\theta \tag{3.3.28}$$

自旋期待值的时间演化和经典方程完全一致，用自旋相干态我们验证了量子和经典之间的对应关系。所以, 观察到的热中子干涉是由 Larmor 进动相位引起的，是动力学效应。只有在使用自旋沿磁场方向极化的中子束, 并在不论及自旋的内禀结构的条件下，才可以看作是纯标量势引起的拓扑相位干涉效应。

3.4 轴对称静电场中的中子动力学和 AC 效应

3.4.1 经典动力学

根据 AC 的理论模型，考虑沿 z 轴的无限长电荷线，因为自旋存在，沿 z 轴的动力学平移对称被破坏，动力学空间不再是 $M = \mathbf{R}^2 - \{0\}$，而变为 $M = \mathbf{R}^3 - \{z\}$，三维空间去掉 “z” 轴，但二者是拓扑等价的。电荷线的轴对称电场是

$$\boldsymbol{E} = \frac{2\eta}{r^2}(x\boldsymbol{e}_x + y\boldsymbol{e}_y) \tag{3.4.1}$$

其中, $r^2 = x^2 + y^2$ 。代入前面的动力学方程，引入参数

$$q = \frac{2\mu\eta}{c}$$

则有

$$m\ddot{x} = q\dot{z}\left[S_x\frac{\partial}{\partial y} - S_y\frac{\partial}{\partial x}\right]\frac{x}{r^2} + q\frac{y}{r^2}\dot{S}_z \tag{3.4.2}$$

$$m\ddot{y} = q\dot{z}\left[S_x\frac{\partial}{\partial y} - S_y\frac{\partial}{\partial x}\right]\frac{y}{r^2} - q\frac{x}{r^2}\dot{S}_z \tag{3.4.3}$$

$$m\ddot{z} = -q\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[S_x\frac{y}{r^2} - S_y\frac{x}{r^2}\right] \tag{3.4.4}$$

自旋运动方程

$$\dot{S}_x = -q\left[\dot{x}\frac{y}{r^2} - \dot{y}\frac{x}{r^2}\right]S_y + q\dot{z}\frac{x}{r^2}S_z \tag{3.4.5}$$

$$\dot{S}_y = q\left[\dot{x}\frac{y}{r^2} - \dot{y}\frac{x}{r^2}\right]S_x + q\dot{z}\frac{y}{r^2}S_z \tag{3.4.6}$$

$$\dot{S}_z = -q\dot{z}\left[\frac{x}{r^2}S_x + \frac{y}{r^2}S_y\right] \tag{3.4.7}$$

当 $q \ll 1$ 及初条件 $\dot{z}(0) = 0$ 时，计算到 q 的线性项，可得近似解

$$\ddot{x} = 0 \tag{3.4.8}$$

$$\ddot{y} = 0 \tag{3.4.9}$$

$$\dot{z} = -\frac{q}{m}\left[S_x\frac{y}{r^2} - S_y\frac{x}{r^2}\right] + \frac{q}{m}a \tag{3.4.10}$$

其中

$$a = \frac{S_x(0)y(0) - S_y(0)x(0)}{r^2(0)} \tag{3.4.11}$$

是由初位置和自旋初始值确定的常数, 中子沿 z 方向不是自由运动。忽略 z 方向的运动 $\dot{z} = 0$, 自旋运动方程的解是

$$S_x(t) = S_x(0)\cos(q\varphi(t)) + S_y(0)\sin(q\varphi(t)) \tag{3.4.12}$$

$$S_y(t) = -S_x(0)\sin(q\varphi(t)) + S_y(0)\cos(q\varphi(t)) \tag{3.4.13}$$

$$S_z(t) = S_z(0) \tag{3.4.14}$$

自旋绕 z 轴进动, 其中

$$\varphi(t) = \arctan\frac{y(t)}{x(t)} \tag{3.4.15}$$

图 3.4.1 是中子坐标空间轨道运动和自旋进动的示意图。

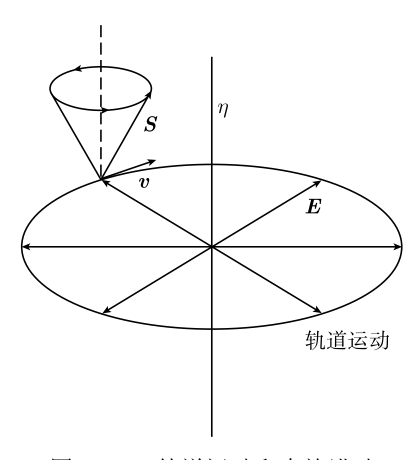


图 3.4.1　轨道运动和自旋进动

作业 3.3 如图 3.4.1 所示，但中子自旋极化和轴对称电场垂直 (z 轴), 证明中子沿圆周轨道绕电荷线一周后相互作用部分作用量的变化就是内禀角动量 (差 -2π), 证明它是一拓扑不变量, 和运动速度和圆周半径均无关。

3.4.2 非 Abel 规范场和微分联络

忽略沿 z 方向的运动，得到近似拉氏量为

$$L \approx L_0 + L_{\rm i}$$

自旋–轨道相互作用部分是

$$L_{\rm i} = qS_z \frac{x\dot{y} - y\dot{x}}{r^2} \tag{3.4.16}$$

可写为

$$L_{\rm i} = \boldsymbol{A} \cdot \dot{\boldsymbol{r}}$$

其中, 等效矢势即非 Abel 规范场在平面极坐标中可写为

$$\boldsymbol{A} = \frac{q}{r} S_z \boldsymbol{e}_\varphi \tag{3.4.17}$$

$\boldsymbol{e}_\varphi$ 为角方向单位矢量。规范场在坐标原点 (线电荷的位置) 有奇异性, 除去坐标原点, 拉氏量定义的空间是

$$F = M \times S^1$$

$M = \mathbf{R}^2 - 0$ 是除去坐标原点的二维平面, 而 S^1 表示一维环, 因为自旋 S_z 是守恒量, 自旋空间退化成 S^1。

$$L_{\rm i} = qS_z \frac{{\rm d}\varphi}{{\rm d}t} \tag{3.4.18}$$

是一个 Wess-Zumino 相互作用项。微分联络一次式 (connection one-form)

$$\omega = \boldsymbol{A} \cdot {\rm d}\boldsymbol{r} = qS_z {\rm d}\varphi \tag{3.4.19}$$

是封闭的 (closed) 也即微分二次式 (two-form) 为零

$${\rm d}\omega = 0 \tag{3.4.20}$$

但不是确定的 (not exact), 因为微分联络一次式没有确定的积分。我们看到，自旋模型的非 Abel 规范场和点电荷 AB 模型的规范势类似，但自旋模型多一个自由度 S^1, 自旋可绕 z 轴进动, 如果选沿电荷线轴 (z 轴) 极化的自旋, S^1 收缩成一个点, 自旋模型则退化为 AC 模型, 在不考虑自旋内禀结构情况下, 和 AB 组态等价。

3.4.3 非 Abel 几何相位和分数自旋

平面极坐标中和变量 r,φ 共轭的正则动量是

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}$$

和

$$L_z^c = \frac{\partial L}{\partial \varphi} = mr^2\dot{\varphi} + qS_z$$

显然 L_z^c 是绕 z 轴的总角动量, 包含粒子空间运动角动量 $mr^2\dot{\varphi}$ 和来自自旋轨道耦合的内禀角动量部分 qS_z, 量子化的自旋角动量是

$$\hat{S}_z = \hbar\frac{\hat{\sigma}_z}{2} \tag{3.4.21}$$

Hamilton 算符为

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r}\left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - \mathrm{i}\frac{q}{2}\hat{\sigma}_z\right)\right]^2 \tag{3.4.22}$$

波函数有和 AB 态类似的不可积相同因子 —— 非 Abel 几何相位

$$\Psi = \psi_0(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{q}{2}\hat{\sigma}_z\int^{\varphi}\mathrm{d}\varphi'}|\sigma\rangle \tag{3.4.23}$$

可导致相位干涉效应。

$$|\sigma\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$$

是任意自旋态, $\psi_0(\boldsymbol{r})$ 表示自由粒子空间波函数。

正则角动量和力学角动量算符分别是

$$\hat{L}_z^c = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\hat{L}_z^k = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[\frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{q}{2}\hat{\sigma}_z\right] \tag{3.4.24}$$

自旋–轨道耦合提供了一个非常自然和直观的分数自旋 (任意子) 量子力学模型, 总角动量本征态应该是

$$\Psi_m(\pm) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\frac{q}{2}\varphi}|\pm\rangle \tag{3.4.25}$$

对应的正则角动量和力学角动量量子数分别为

$$l_\mathrm{c} = m \pm \frac{q}{2}$$

$$l_\mathrm{k} = m$$

力学角动量 (在我们的模型中是轨道角动量) 本征值是整数, 而正则角动量 (轨道加内禀角动量) 本征值依赖于参数 q。当 q 为整数时, 该模型覆盖了 Bose 和 Fermi 子自旋: 奇数 q 是 Fermi 子, 偶数 q 是 Bose 子。非整数 q 则是任意子。

3.4.4 AC 效应和中子干涉实验

对于自旋极化粒子, 假定自旋极化方向沿 z 轴, 因而方程 (3.4.23) 中自旋态 $|\sigma\rangle$ 是 $\hat{\sigma}_z$ 的本征态

$$|\sigma\rangle = |\pm\rangle$$

非 Abel 几何相位退化为通常的 $U(1)$ 规范场几何相 ——AC 相位

$$\Psi = \psi_0(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\frac{q}{2}\int^{\varphi}\mathrm{d}\varphi'}|\pm\rangle \tag{3.4.26}$$

1. 中子干涉实验

图 3.4.2 是为验证 AC 效应的中子干涉实验示意图，分为两路径“1”和“2”的中子束分别经过和运动方向垂直、相互反向的电场，例如平行板电容器内的匀强电场，假定电场强度为 $\boldsymbol{E}$。

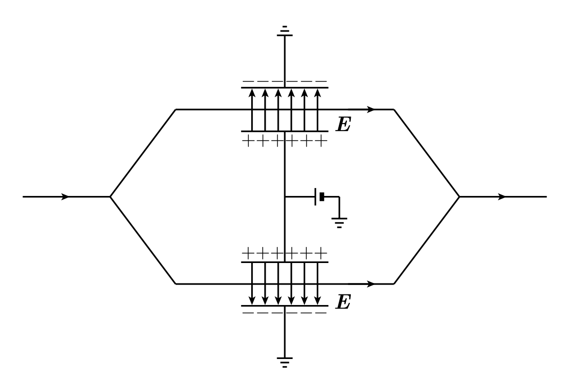


图 3.4.2 中子干涉实验示意图

2. 经典动力学方程和 Larmor 进动角

忽略掉电场不均匀性引起的力作用, 中子的质心运动方程近似为自由运动

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = 0$$

假定路径“1”的中子运动沿 y 方向，电场沿 x 方向 (图 3.4.2)。经典自旋在外电场中的运动方程是

$$\dot{S}_x = -\frac{\mu E}{c} S_y \dot{y} \tag{3.4.27}$$

$$\dot{S}_y = \frac{\mu E}{c} S_x \dot{y} \tag{3.4.28}$$

$$\dot{S}_z = 0 \tag{3.4.29}$$

$\dot{y}$ 是中子运动速度, 路径“2”中的电场反向。自旋绕 z 轴进动，Larmor 进动频率是

$$\omega = \frac{\mu E \dot{y}}{c} \equiv q\dot{y}$$

若中子在电场中的运动时间为 T，则 Larmor 进动角可求得为

$$\Omega = \omega T = ql \equiv 2\pi\alpha \tag{3.4.30}$$

l 是粒子在电场中运动的路程。

3. 中子物质波干涉及理论解释

很容易得到在 $\pm x$ 方向的电场中 (路径 1，2) 的 Hamilton 算符是

$$\hat{H}_{\pm} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} \mp \frac{\mathrm{i}q}{2}\hat{\sigma}_z\right]^2 \tag{3.4.31}$$

波函数有非 Abel 几何相位

$$\Psi = \psi_0(y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{q}{2}\hat{\sigma}_z y}|\sigma\rangle \tag{3.4.32}$$

当中子自旋沿和外场及运动方向垂直的方向 (z 轴方向) 极化时, 非 Abel 几何相位退化为 $U(1)$ 规范场相位 (AB 相), 我们可得到 AC 相位干涉, 它和 AB 效应对等 (再次强调, 不涉及自旋内禀结构)。因为实验中用的是热中子，自旋无极化，如前所述，应选自旋相干态。沿空间任意方向 $\boldsymbol{n}$ 极化的中子在路径“1”和“2”的自旋相干态分别是

$$|\boldsymbol{n}_+\rangle_1 = \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi q}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi q}|-\rangle \tag{3.4.33}$$

$$|\boldsymbol{n}_+\rangle_2 = \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi q}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi q}|-\rangle \tag{3.4.34}$$

到达计数器的自旋态为

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\boldsymbol{n}_+\rangle_1 + |\boldsymbol{n}_+\rangle_2) \tag{3.4.35}$$

粒子数几率为

$$I_{\boldsymbol{n}} = (1 + \cos\pi q) \tag{3.4.36}$$

对于热中子，粒子数几率应对所有极化方向求平均

$$I = \frac{1}{4\pi}\int I_{\boldsymbol{n}} \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi = (1 + \cos\pi q) \tag{3.4.37}$$

自旋相干态上自旋算符期待值的时间演化和经典自旋满足相同的方程。结论：热中子实验结果应被解释为 Larmor 进动角引起的干涉。AC 效应的实验验证, 应采用沿 z 轴极化的中子。区别在于前者有动力学解释，而后者是拓扑相位干涉，无动力学对应 (裸粒子角度)。AC 效应仅是自旋–轨道耦合动力学模型的一特殊或者极限情况。

3.5 原子中的自旋–轨道耦合

原子中电子在中心力场中的 Hamilton 量可写为

$$H = H_0 + H_{\text{sp}} \tag{3.5.1}$$

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r)$$

其中, $V(r)$ 表示库仑势, 自旋–轨道耦合项, 用本章中给出的公式表示为

$$H_{\text{sp}} = -\frac{\mu}{c}(\boldsymbol{E} \times \dot{\boldsymbol{r}}) \cdot \boldsymbol{S} \tag{3.5.2}$$

若 $\boldsymbol{S} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\hbar$ 表示自旋算符，则自旋磁矩常数是

$$\mu = \frac{e\hbar}{mc}$$

中心力场电场强度可表示为

$$\boldsymbol{E} = -\frac{1}{er}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{r} \tag{3.5.3}$$

因为

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}$$

和轨道角动量定义

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

因而自旋轨道 Hamilton 变为

$$H_{\text{sp}} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{\mathrm{d}V(r)}{r\mathrm{d}r}\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tag{3.5.4}$$

公式中的 $\boldsymbol{l}$ 代表无量纲的轨道角动量算符, 而 $\boldsymbol{\sigma}$ 则是 Pauli 算符。自旋–轨道耦合导致原子光谱的精细结构。

3.6 半导体中的自旋–轨道耦合

半导体介观体系中的自旋–轨道耦合和二维系统中基于自旋–轨道耦合的自旋 Hall 效应研究, 近年来引起广泛的注意, 因为人们寄希望于开发出自旋量子器件。我们仍然从自旋粒子的经典拉氏量出发, 只考虑自旋轨道耦合 Hamilton 量，方程 (3.1.13) 的 Hamilton 量中

$$\boldsymbol{E} = -\nabla V \tag{3.6.1}$$

和

$$\boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k}$$

以及

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

自旋轨道耦合 Hamilton 量则为

$$H_{\mathrm{so}} = \frac{\mu\hbar^2}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla V \times \boldsymbol{k}) = -\frac{\mu\hbar^2}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{k})\cdot\nabla V \tag{3.6.2}$$

3.6.1 Rashba 耦合

自旋轨道耦合是相对论效应，通常很小，但在半导体中当能隙和自旋轨道耦合劈裂在同一量级时，由外场引出的自旋轨道耦合不能忽略，方程 (3.6.2) 在文献中的形式为

$$H_{\mathrm{R}} = \alpha(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{z} \tag{3.6.3}$$

称为 Rashba 自旋轨道耦合，和波矢 $\boldsymbol{k}$ 是线性关系，$\boldsymbol{z}$ 是外场方向单位矢量, α 是耦合系数。

3.6.2 Dresselhaus 耦合

另一种被称为 Dresselhaus 耦合的 Hamilton 算符可写为

$$H_{\mathrm{D}} = \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{3.6.4}$$

其中

$$\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{k}) = \beta[k_z(k_x^2 - k_y^2)\boldsymbol{e}_z + k_y(k_z^2 - k_x^2)\boldsymbol{e}_y + k_x(k_y^2 - k_z^2)\boldsymbol{e}_x] \tag{3.6.5}$$

是晶体内禀等效磁场，对波矢 $\boldsymbol{k}$ 的依赖是非线性的。

3.7 附录：自旋运动方程的推导

作用量对空间坐标变分很容易得到运动方程 (3.1.7)，可使用方程 (3.1.9) 中的拉氏量计算。自旋运动方程则可由对 g 变分求得, 自旋 $-\frac{1}{2}$ 表示的微小变分的一般形式是

$$\delta g = \mathrm{i}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\sigma} g$$

$$\delta g^{-1} = -\mathrm{i}g^{-1}\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

$\boldsymbol{\epsilon}$ 是无穷小量。

最小作用量原理为

$$\delta\mathcal{S}=\int[\delta L_0+\delta L_{\rm i}]{\rm d}t=0 \tag{3.7.1}$$

代入 g 和 g^{-1} 的微小变分定义式并用方程 (3.1.4), 则可分别得到

$$\delta L_0={\rm i}\lambda{\rm Tr}[\sigma_3\delta g^{-1}\dot{g}+\sigma_3 g^{-1}\delta\dot{g}]=-{\rm Tr}[\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\sigma}\dot{\boldsymbol{\epsilon}}\cdot\boldsymbol{\sigma}]=-2\boldsymbol{S}\cdot\dot{\boldsymbol{\epsilon}} \tag{3.7.2}$$

和

$$\begin{aligned}\delta L_i&=\frac{\mu\lambda}{c}{\rm Tr}\left[(\delta g\sigma_3 g^{-1}+g\sigma_3\delta g^{-1})\left(\frac{\boldsymbol{E}\times\dot{\boldsymbol{r}}}{c}+\boldsymbol{B}\right)\cdot\boldsymbol{\sigma}\right]\\&=-2\mu\left[\boldsymbol{S}\times\frac{\boldsymbol{E}\times\dot{\boldsymbol{r}}}{c}+\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{B}\right]\dot{\boldsymbol{\epsilon}}\end{aligned} \tag{3.7.3}$$

因子 “2” 来自对 2×2 单位矩阵求迹。把方程 (3.7.2) 和方程 (3.7.3) 代入最小作用量原理方程 (3.7.1), 并用分部积分, 则得自旋运动方程 (3.1.8)。

参 考 文 献

Aharonov Y, Casher A. 1984. Topological quantum effects for neutral particles. Phys. Rev. Lett., 53: 319

Balachandran A P, Marmo G, Skagerstam B S, et al. 1983. Gauge Symmetries and Fibre Bundels. Springer-Verlag, Berlin

Cimmino A, Opat G I, Klein A G, et al. 1989. Observation of the topological Aharonov-Casher phase shift by neutron interferometry. Phys. Rev. Lett., 63: 380

Cimmino A, Opat G I, Klein A G. 1992. Scalar Aharonov-Bohm experiment with neutrons. Phys. Rev. Lett., 68: 2409

Ding X X, Liang J Q. 1994. Neutral spinning particles in electromagnetic field and neutron interference. Science in China, A37: 1200

Fei H M, Li Z J, Nie Y H, Liang J Q. 2008. Spin rotation and polarization of transport electrons through a three-electrode Ahanronov-Bohm ring with spin-orbit coupling. Mod. Phys. Letts., B22: 1661～1672

Gao Y F, Zhang Y P, Liang J Q. 2004. Transport of spin-polarized current through a mesoscopic ring with two leads induced by Aharonov-Bohm and Aharonov-Casher phases. Chin. Phys. Lett., 21: 2093～2096

Gao Y F, Zhang Y P, Liang J Q. 2005. Transport of spin-polarized current through a double Aharonov-Bohm rings in the presence of magnetic impurity. Chin. Phys., 14: 196～200

Li Z J, Jin Y H, Nie Y H, Liang J Q. 2008. Electron transport through double quantum dots with spin-polarization dependent interdot coupling. Phys. —Condensed Matter, 20: 085214

Li Z J, Liang J Q, Kobe D H. 2001. Larmor Precession and barrier tunneling time of a neutral spining particle. Phys. Rev., A64: 042112

Li Z J, Liang J Q, Kobe D H. 2002. Lamor precession and tunneling time of a relativistic neutral spinning particle through an arbitrary potential barrier. Phys. Rev., A65: 024101

Li Z J, Liang J Q, Pu F C. 2001. The Aharonov-Casher phase and persistent current in a polyactylene ring. Phys.: Condens. Mat., 13: 617

Li Z J, Nie Y H, Liang J J. Liang J Q. 2003. Larmor precession and dwell time of a relativistic particle scattered by a rectangular quantum well. Phys. A: Math. Gen., 36: 6563

Li Z J, Nie Y H, Liang J Q, et al. 2002. Larmor Procession and tunneling time of non-relativistic neutral spin-1/2 particle trough an arbitrary potential barrier. Phys. Lett., 19: 10

Liang J Q, Ding X X. 1989. New model of fractional spin. Phys. Rev. Lett., 63: 831

Liang J Q, Ding X X. 1993. Dynamics of a neutron in electromagnetic fields and quantum phase interference. Phys. Lett., A176: 165

Liang J Q, Ding X X. 1999. Larmor precession and the barrier interaction time. Acta Physica Sinica-Overseas, 8(6): 409～415

Liang J Q, Marmo G, Simoni A, et al. 1992. Dynamics in two dimensional space for a neutron in electromagnetic fields. Mod. Phys. lett., A5: 2361

Peshkin M. 1992. Comment on scalar Aharonov-Bohm experiment with neutrons. Phys. Rev. Lett., 69: 2017

Rashba I. 2006. Spin-orbit coupling and spin transport. Physica E, 34: 31

Reznik B, Aharonov Y. 1989. Question of the nonlocality of the Aharonov-Casher effect. Phys. Rev., D40: 4178

Wang R, Liang J Q. 2006. Spin-polarized quantum transport through a T-shape quantum dor-array: Model of spin splitter. Phys. Rev., B74: 144302

Wang R, Wang J M, Liang J Q. 2007. Spin-polarization-dependent quantum transport through a quantom-dot array. Physica B, 387: 172～178

Wang R, Zhang C X, Wang J M, Liang J Q. 2008. Spin-dependent tunneling through an indirect double-barrier structure. Chin. Phys., B17: 3438～3443

Wu M W, Jiang J H, Weng M Q. 2010. Spin dynamics in semiconductors. Phys. Rept., 493: 62

Ye C Z, Li Z J, Nie Y H, Liang J Q. 2008. Rashba spin-orbi interaction induced spin-polarized Andreev-reflection current through a double Aharonov-Bohm interferometer. Appl J. Phys., 104: 053721

Ye C Z, Xue R, Nie Y H, Liang J Q. 2009. Dresselhaus spin-orbit coupling induced spin-polarization and resonance-split in n-well semiconductor superlattices. Physics Letters

A, 373: 1290

Ye C Z, Xue R, Nie Y H. Liang J Q. 2009. Dresselhaus spin-orbit coupling induced spin-polarization and resonancesplit in n-well semiconductor superlattices. Physics Letters A, Volume, 373: 1290∼1293

Ye C Z, Zhang C X, Nie Y H, Liang J Q. 2007. Field-assisted resonance tunneling through a symmetric double-barrier structure with spin-orbit coupling. Phys. Rev., B76: 035345

Yu H, Liang J Q. 2005. Spin current and shot noise in singlemolecule quantum dots with a phonon mode. Phys. Rev., B72: 075351

Yu H, Liang J Q. 2005. Spin-polarized transport through a coupled double-dot. Eur. Phys. J., B43: 421∼427

Yu H, Liang J Q. 2006. Spin-polarized transport through a coupled double-quantum-dot. Phys. Lett., A358: 39∼46

Zhang C X, Nie Y H, Liang J Q. 2006. Photon-assisted electron transmission resonance through a quantum w ell with spin-orbit coupling. Phys. Rev., B73: 085307

Zhang G F, Gao Y F, Yin W, Liang J Q. 2004. Spin dynamics of supramolecular dimer[Mn4]2 interacting with a spin-polarized electron. Chin. Phys. Lett., 21: No.4, 598

Zhang G, Yin W, Gao Y F, Liang J Q. 2004. Dynamics of molecular magnet Fe8 interacting with an injecting spinpolarized electron. Mod. Phys. Lett., B18: 479

Zhang Y P, Liang J Q. 2004. Spin-Polarized quantum transport through a quantum dot in time-varying magnetic field. Phys. Lett., A329: 55

Zhao H, Zhang G F, Wen Y, Liang J Q. 2004. Spin current in double quantum dot. Chinese Physics, 13(6): 938∼941

第 4 章　量子态的时间演化和几何相位

4.1　引　　言

当一个量子系统的多重参数随时间绝热演化时，系统会保持在其初始本征态，Berry 首次提出，除通常的动力学相因子外, 还附加一个依赖参数空间路径的相因子，即便参数演化回到其初始值，附加相因子也不为零，而仅取决于参数空间闭合路径的几何特性，现称为 Berry 相位或几何相位。Simon 指出, Berry 相位其实是 $U(1)$ 厄米丛 (Hermitian bundle) 由 Bott-Chern 联络产生的反常和乐 (anholonomy), 接着 Aharonov 和 Annada 把绝热近似的条件去掉，得到周期演化系统的几何相，也称为 AA 相因子，它等同于时间周期变化的 Flouque 波函数相位。Wilczek 和 Zee 讨论简并态的几何相因子，把 $U(1)$ 厄米丛推广到 $U(N)$ 情况，并第一次在非相对论量子力学中提出了非 Abel 规范场概念。几何相因子理论的重要应用是解释了整数量子 Hall 效应和反常 Hall 效应等。另外，几何相位只依赖演化路径的几何特性，具备内在的抗错能力, 因而提供了一抗错量子计算的途径。最近的研究是把量子多体系统的几何相因子和量子相变连在一起，讨论临界点邻域的几何相因子临界行为。本章中，我们介绍量子态时间演化的一般理论和几何相因子的引入及其几何解释、$U(1)$ 厄米丛、平行移动和反常和乐的基本概念。提出了用含时规范变换求量子态时间演化精确解和几何相的普遍方法及其应用例，特别是在量子化光场系统中的应用。基于分子磁体系统的非 Abel 规范场物理模型则是在非相对论量子力学中实现场理论概念的尝试。

4.2　非简并瞬时本征态和绝热 Berry 相位

若 Hamilton 量显含时间，它就不是守恒量

$$\frac{\mathrm{d}\hat{H}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \neq 0$$

换句话说，不是好量子数。若 $\hat{H}$ 有非简并瞬时本征态

$$\hat{H(t)}|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \tag{4.2.1}$$

含时 Schrödinger 方程的通解为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n(t)\rangle \tag{4.2.2}$$

代入含时 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n \dot{c_n}|n(t)\rangle + \mathrm{i}\hbar\sum_n c_n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|n(t)\rangle = \sum_n c_n(t)E_n(t)|n(t)\rangle \tag{4.2.3}$$

得到展开系数的微分方程为

$$\mathrm{i}\hbar\dot{c_n} + \mathrm{i}\hbar\sum_n c_n\langle m(t)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|n(t)\rangle = c_m(t)E_m(t) \tag{4.2.4}$$

利用绝热近似条件

$$\langle m(t)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|n(t)\rangle = 0, \quad m \neq n \tag{4.2.5}$$

得到

$$c_m(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_m(t')\mathrm{d}t'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_m(t)}c_m(0) \tag{4.2.6}$$

其中多出的相因子为

$$\gamma_m(t) = \mathrm{i}\int_0^t \langle m(t')|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}|m(t')\rangle\mathrm{d}t' \tag{4.2.7}$$

若系统通过多重参数含时，例如

$$\boldsymbol{R}(t) = (R_1(t), R_2(t), R_3(t), \cdots) \tag{4.2.8}$$

且经过时间 T 后回到初始值

$$\boldsymbol{R}(0) = \boldsymbol{R}(T), \quad \hat{H}(0) = \hat{H}(T) \tag{4.2.9}$$

这时附加相位变为

$$\begin{aligned}\gamma_m(T) &= \mathrm{i}\int_0^T \langle\psi_m(\boldsymbol{R}(t))|\dot{\boldsymbol{R}}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}|\psi_m(\boldsymbol{R}(t))\rangle\mathrm{d}t \\ &= \mathrm{i}\oint \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R}\end{aligned} \tag{4.2.10}$$

Berry 引入等效矢势的概念

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}) = \langle\psi_m(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}|\psi_m(\boldsymbol{R})\rangle \tag{4.2.11}$$

通过环路所围面积的通量为

$$\gamma_m(T) = \mathrm{i}\iint_s \left[\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})\right]\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{4.2.12}$$

用更时髦的语言

$$\omega \equiv \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R}$$

称为联络一次式 (connection one-form)，即厄米丛的 Bott-Chern 联络，而

$$\boldsymbol{\Omega} \equiv \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$$

是 Berry 曲率 (Berry curveture)。

4.3 周期演化和 AA 相位

Aharonov 和 Annada 把绝热近似条件去掉，得到周期演化系统的几何相，也称为 AA 相位。如果 Hamilton 依赖的含时参数是周期演化的，周期是 T, 例如

$$\boldsymbol{R}(t+T)=\boldsymbol{R}(T)$$

则 Hamilton 算符也具有周期性

$$\hat{H}(t+T\}=\hat{H}(t)$$

定义一时间平移算符 $\hat{T}$

$$\begin{aligned}\hat{T}|\psi(t)\rangle &= |\psi(t+T)\rangle \\ \hat{T}^{-1}|\psi(t)\rangle &= |\psi(t-T)\rangle\end{aligned} \tag{4.3.1}$$

因为 Hamilton 算符的周期性

$$\hat{T}\hat{H}(t)\hat{T}^{-1}=\hat{H}(t+T)=\hat{H}(t) \tag{4.3.2}$$

它和时间平移算符对易

$$[\hat{H},\hat{T}]=0$$

因而有共同的本征态, 假定

$$\hat{T}|\psi(t)\rangle=\lambda|\psi(t)\rangle$$

用时间平移算符的特性，不难得到时间平移算符的本征值是

$$\lambda=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(t)}$$

$k(t)$ 是时间的实线性函数，Hamilton 算符和时间平移算符的共同本征态是 Flouque 态

$$\psi(t)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(t)}|u(t)\rangle \tag{4.3.3}$$

其中

$$|u(t+T)\rangle=|u(t)\rangle$$

是时间周期函数。代入含时 Schrödinger 方程，不难证明经过一个周期演化, 总相位 $k(T)$ 中除去通常的动力学相位, $-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_0^{\mathrm{T}}\langle u(t)|\hat{H}(t)|u(t)\rangle\mathrm{d}t$ 外还有一个几何相

$$\gamma(T)=\mathrm{i}\oint\langle u(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}|u(\boldsymbol{R})\rangle\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R} \tag{4.3.4}$$

和前面一样，这里我们仍然假定了系统通过多重参数 $\boldsymbol{R}$ 含时。

4.4 含时规范变换和规范固定

Schrödinger 方程中

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi\rangle = \hat{H}(t)|\psi\rangle \tag{4.4.1}$$

Hamilton 算符显含时间，作一含时规范变换

$$|\psi'\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle \tag{4.4.2}$$

其中, $\hat{U}$ 是一含时幺正算符，代入原 Schrödinger 方程，得到形式不变的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi'\rangle = \hat{H}'|\psi'\rangle \tag{4.4.3}$$

其中

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger - \mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger \tag{4.4.4}$$

是新规范中的 Hamilton 算符。若使用原规范中的 Hamilton 算符瞬时本征态

$$\hat{H}|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \tag{4.4.5}$$

而且

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n(t)\rangle$$

则

$$|\psi'\rangle = \sum_n c_n(t)\hat{U}|n(t)\rangle \tag{4.4.6}$$

代入方程 (4.4.3) 得到的 Berry 相位不变。应当强调的是只当在固定规范，即选原规范的定态 Schrödinger 方程 (4.4.5) 条件下，才有不变性，但瞬时定态 Schrödinger 方程不是规范变换不变的，即

$$|n'(t)\rangle = \hat{U}|n(t)\rangle$$

不是新规范中 Hamilton 算符 $\hat{H}'$ 的本征态。很容易验证

$$\hat{H}'|n'(t)\rangle = \left(E_n - \mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger\right)|n'(t)\rangle \tag{4.4.7}$$

换句话说，如果选 $\hat{H}'$ 的瞬时本征态，则得到不同的动力学相位和 Berry 相，特别是，当 $\hat{H}'$ 的本征态不含时间时，则只有动力学相位，因而，计算 Berry 相必须固定规范。这里我们强调，固定规范指选定 Hamilton 算符及相应的瞬时本征态。

4.5 坐标和动量空间的几何相

以上, Berry 相位的论述是基于多重参数含时 Hamilton 系统，参数空间也可是坐标或动量，我们分别给出坐标和动量空间演化的几何相位。

4.5.1 带电粒子环绕磁通运动的几何相位——AB 相位

考虑与一无限长磁通线 $\Phi = \alpha\Phi_0$ (如前定义 Φ_0 是磁通的量子单位) 垂直的二维平面内有一受限带电粒子，电荷为 e，例如，带电粒子被约束在一个介观球形腔内，小球可在除去磁通位置 (选为坐标原点) 外的平面内运动，假定小球中心坐标为 $\boldsymbol{R}(t)$, 根据第 2 章中的讨论，带电粒子的波函数显然可写为 Dirac 不可积相因子形式

$$|\psi(\boldsymbol{R}(t)\rangle = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\int^{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}')\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R}'}|u\rangle \tag{4.5.1}$$

其中

$$\boldsymbol{A} = \frac{\Phi}{2\pi R}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{4.5.2}$$

表示在磁通位置为原点的平面极坐标内小球中心位置的磁通规范场, $\boldsymbol{e}_\varphi$ 是角方向单位矢量。$|u\rangle$ 表示带电粒子在球形腔内的态 (束缚态)，因为磁通规范场不可能对局域在球形腔内的带电粒子的运动产生任何作用，因而, 内态 $|u\rangle$ 与磁通无关也和小球的位置无关。当小球在空间沿一闭合路径绝热移动 (保持内部态不变) 回到起始位置时，几何相位可由前面推导的公式 4.2.10 (小球位置 $\boldsymbol{R}$ 看作参数) 直接计算

$$\begin{aligned}\gamma &= \mathrm{i}\oint\langle\psi(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}|\psi(\boldsymbol{R})\rangle\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R}\\ &= \frac{e}{\hbar c}\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R}\end{aligned} \tag{4.5.3}$$

这正是 AB 相位，当闭合路径环绕磁通时

$$\gamma = \pm 2\pi\alpha$$

$\pm$ 分别表示顺时针和逆时针方向旋转一周，当闭合路径不环绕磁通时，则几何相为零

$$\gamma = 0$$

我们完全用物理的图像和语言, 解释了坐标空间的几何相位，证明它和 AB 相一致，更数学的语言是，沿给定路径平行移动 (parallel transport) 定态波包。

4.5.2 $U(1)$ 厄米丛, 平行移动和反常和乐

方程 (4.5.1) 定义的态矢 $|\psi(\boldsymbol{R})\rangle$ 实际上是定义在参数空间 (坐标为 $\boldsymbol{R}$) 的

$U(1)$ 厄米丛截面，存在一自然的微分联络一次式

$$\omega = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{R} = \alpha \mathrm{d}\varphi \tag{4.5.4}$$

考虑参数空间一闭合路径 c, 其上的坐标 $\boldsymbol{R}(t)$ 可用 t 参数化，t 可看作时间，从 $t=0$ 开始，$t=T$ 回到起始点，在路径 c 上的态矢为

$$|\psi_c(\boldsymbol{R}(t))\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_c(t)}|\psi(\boldsymbol{R}(t))\rangle \tag{4.5.5}$$

$$|\psi_c(\boldsymbol{R}(0))\rangle = |\psi(\boldsymbol{R})\rangle$$

相因子 $\gamma_c(t)$ 只依赖路径 c 的参数 t, 该态矢则是一和乐群元 (holonomy group element), 平行移动要求 Lie 导数为零，即

$$L_{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}}|\psi_c(\boldsymbol{R}(t))\rangle = \left[\frac{\partial}{\partial t} + \dot{\boldsymbol{R}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}}\right]\bigg|\psi_c(\boldsymbol{R}(t))\rangle = 0 \tag{4.5.6}$$

把态矢方程 (4.5.5) 代入式 (4.5.6)，演化一周的几何相位 $\gamma_c(T)$ 就是方程 (4.5.3)。非零和整数 2π 的几何相是由于非整数磁通和多连通空间共同导致的反常和乐 (quantum anholonomy)。称其为反常是相对正常而言，通常的量子和乐对应的几何相位只能是零或 2π 的整数倍，这也正是磁通量子化和整数量子 Hall 效应的几何原因。

4.5.3 动量空间，能带中 Bloch 电子动力学和整数量子 Hall 效应

周期势场中的波函数是空间周期调制的平面波，即 Bloch 波，作 Fourier 变换, 把格点波矢换到动量空间 (或者波矢空间) 中, 几何相位是

$$\begin{aligned}\gamma_m &= \mathrm{i}\oint \langle u_m(\boldsymbol{k})|\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}}|u_m(\boldsymbol{k})\rangle \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{k} \\ &= \mathrm{i}\iint_s \boldsymbol{\Omega}_m \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}\end{aligned} \tag{4.5.7}$$

$|u_m(\boldsymbol{k})\rangle$ 是能带波函数，m 是能带指标，其中

$$\boldsymbol{\Omega}_m = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} \times \langle u_m(\boldsymbol{k})|\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}}|u_m(\boldsymbol{k})\rangle \tag{4.5.8}$$

是 Berry 曲率。动量空间几何相已被广泛应用于凝聚态理论中。

对于空间二维平面格点，Berry 曲率和 k 空间平面垂直

$$\Omega_m = \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial k_1}u_m \middle| \frac{\partial}{\partial k_2}u_m \right\rangle - \left\langle \frac{\partial}{\partial k_2}u_m \middle| \frac{\partial}{\partial k_1}u_m \right\rangle\right] \tag{4.5.9}$$

几何相是

$$\gamma_m = \mathrm{i}\iint_s \Omega_m \mathrm{d}k_1 \mathrm{d}k_2 \tag{4.5.10}$$

用均匀磁场中的二维格点模型, Thouless 推导出用几何相位表示的 Hall 电导

$$\sigma_{\mathrm{H}}=\frac{\mathrm{e}^2}{h}\frac{\gamma_m}{2\pi} \tag{4.5.11}$$

对于单连通二维平面，只能有正常量子和乐, 几何相位必须是

$$\gamma_m=2n\pi \tag{4.5.12}$$

n 是整数，即陈数，从而给出了整数量子 Hall 效应的几何解释。

如果能带中 Bloch 电子波包质心坐标和波矢 (动量) 表示为 $\boldsymbol{r}_c$ 和 $\boldsymbol{k}_c$, 质心速度方程是

$$\dot{\boldsymbol{r}}_c=\frac{\partial E_m}{\hbar\partial \boldsymbol{k}_c}-\dot{\boldsymbol{k}}_c\times\boldsymbol{\Omega}_m \tag{4.5.13}$$

第一项的意义很明显，第二项则是新发现 (有兴趣的读者可参看相关文献)。几何相位在凝聚态的有关问题中起极其重要的作用。

4.6 不变量和规范不变的相位

Hamilton 量显含时间的系统中，Hamilton 不是守恒量，能量也不是好量子数，因和“外界”有能量交换, 较合理的作法是选一厄米不变量 (守恒量), 以它的本征态作基矢。用厄米不变量处理含时系统量子化, 最早由 Lewis 提出。假定 $\hat{I}$ 是厄米算符，守恒量的条件是其时间全导数为零

$$\frac{\mathrm{d}\hat{I}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{H},\hat{I}]=0 \tag{4.6.1}$$

则 $\hat{I}$ 是不变量，不变量的本征值是好量子数, 不随时间变化。假定 $\hat{I}$ 有瞬时本征态

$$\hat{I}|n(t)\rangle=\lambda_n|n(t)\rangle,\quad \langle m(t)|n(t)\rangle=\delta_{m,n} \tag{4.6.2}$$

很容易证明，其本征值是常数

$$\frac{\mathrm{d}\lambda_n}{\mathrm{d}t}=0 \tag{4.6.3}$$

$|\psi(t)\rangle$ 用厄米不变量本征态展开

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n c_n(t)|n(t)\rangle \tag{4.6.4}$$

代入含时 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n\dot{c}_n(t)|n(t)\rangle+\mathrm{i}\hbar\sum_n c_n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|n(t)\rangle=\sum_n c_n\hat{H}|n(t)\rangle \tag{4.6.5}$$

左乘 $\langle m(t)|$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{c}_m(t)=\sum_n c_n\langle m(t)|-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}+\hat{H}|n(t)\rangle \tag{4.6.6}$$

利用不变量的定义很容易证明下面矩阵是对角的，即

$$\langle m(t)|-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}+\hat{H}|n(t)\rangle=0,\quad m\neq n \tag{4.6.7}$$

系数方程 (4.6.6) 的解是

$$c_m(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_m(t)}c_m(0) \tag{4.6.8}$$

其中

$$\gamma_m(t)=\frac{1}{\hbar}\int_0^t\langle m(t')|\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}-\hat{H}|m(t')\rangle\mathrm{d}t' \tag{4.6.9}$$

是规范不变的相位，由 Lewis 和 Riesefeld 首次得到。如果引入参数空间闭合路径，第一项即给出 Berry 几何相因子。

作业 4.1 证明

(1)

$$\frac{\mathrm{d}\lambda_n}{\mathrm{d}t}=0 \tag{4.6.10}$$

(2)

$$\langle m(t)|\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}-\hat{H}|n(t)\rangle=0,\quad m\neq n \tag{4.6.11}$$

容易证明 γ_m 是规范不变的相位，若

$$|m'(t)\rangle=\hat{U}(t)|m(t)\rangle \tag{4.6.12}$$

$\hat{U}(t)$ 是含时幺正变换算符，即

$$\gamma'_m(T)=\frac{1}{\hbar}\int_0^T\langle m'(t)|\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}-\hat{H}'|m'(t)\rangle\mathrm{d}t=\gamma_m(T) \tag{4.6.13}$$

其中

$$\hat{H}'=-\mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger+\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger \tag{4.6.14}$$

是新规范中的 Hamilton 算符。

4.7 含时系统精确解的规范变换方法

含时规范变换可作为一种精确求解含时系统 Schrödinger 方程的方法，该方法的基本思路是构造一个适当的幺正算符 $\hat{U}(t)$，使在新规范中的 Hamilton 算符 $\hat{H}'$

的瞬时本征态或本征值不随时间变化，直接得到精确解。我们下面先给出基本方法，然后举例解释其应用。新规范中的态矢

$$|\psi'(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(t)\rangle \tag{4.7.1}$$

满足的 Schrödinger 方程是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi'(t)\rangle = \hat{H}'\psi'(t)\rangle \tag{4.7.2}$$

Hamilton 算符变为

$$\hat{H}' = -\mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger + \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger \tag{4.7.3}$$

我们可构造幺正变换算符 $\hat{U}$ 使 $\hat{H}'$ 的本征态不显含时间或者本征值是好量子数，即 $\hat{H}'$ 是不变量。在两种情况下，都可以 $\hat{H}'$ 的本征态作基矢展开得到精确解，无须引入绝热近似。退回原规范, 则得到无绝热近似的 Berry 相和时间演化算符。

不失一般性，我们这里只考虑 $\hat{H}'$ 的本征态不显含时间，第二种情况 ($\hat{H}'$ 是不变量) 的推导和上节不变量一样，无须在此重复。

4.7.1 特解和几何相位

若 $\hat{H}'$ 的本征态是 $|E'\rangle$，它不显含时间

$$\hat{H}'|E'\rangle = E'(t)|E'\rangle \tag{4.7.4}$$

当然一般情况下本征值 $E'(t)$ 是含时的。因为 $|E'\rangle$ 不显含时间，故有特解

$$|\psi'_E(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E'(\tau)\mathrm{d}\tau}|E'\rangle \tag{4.7.5}$$

两边乘以 $\hat{U}^\dagger(t)$，回到原来规范

$$\begin{aligned}|\psi_E(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t)|\psi'_E(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E'(\tau)\mathrm{d}\tau}\hat{U}^\dagger(t)|E'\rangle \\ &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\langle E'|\hat{H}'|E'\rangle\mathrm{d}\tau}|E(t)\rangle \\ &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\langle E'|-\mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{U}^\dagger+\hat{U}\hat{H}\hat{R}^\dagger|E'\rangle\mathrm{d}\tau}|E(t)\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_E}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\langle E(\tau)|\hat{H}|E(\tau)\rangle\mathrm{d}\tau}|E(t)\rangle\end{aligned} \tag{4.7.6}$$

若系统随多重参数 $\boldsymbol{R}(t)$ 含时，且经时间 T 后参数演化回起始值 $\boldsymbol{R}(t+T) = \boldsymbol{R}(t)$，几何相位是

$$\begin{aligned}\gamma_E &= \mathrm{i}\int_0^T \langle E(t)|\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|E(t)\rangle\,\mathrm{d}t \\ &= \mathrm{i}\oint\langle E(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}|E(\boldsymbol{R})\rangle\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R}\end{aligned} \tag{4.7.7}$$

应该说明，我们得到的是含时精确解，无须绝热近似。同时也应注意，$|E(t)\rangle$ 一般情况不是 $\hat{H}$ 的瞬时本征态。

4.7.2 通解和时间演化幺正算符

若本征态矢 $|E'_n\rangle$ 不显含时间

$$\hat{H}'|E'_n\rangle = E'_n(t)|E'_n\rangle \tag{4.7.8}$$

Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi'(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}'|\psi'(t)\rangle \tag{4.7.9}$$

的通解可简单地表示为

$$\begin{aligned}|\psi'(t)\rangle &= \sum_n \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E'_n(\tau)\mathrm{d}\tau} c'_n|E'_n\rangle \\ &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \hat{H}'(\tau)\mathrm{d}\tau}|\psi'(0)\rangle\end{aligned} \tag{4.7.10}$$

其中

$$|\psi'(0)\rangle = \sum_n c'_n|E'_n\rangle = \hat{U}(0)|\psi(0)\rangle \tag{4.7.11}$$

表示初态。

方程 (4.7.10) 两边作用 $\hat{U}^\dagger(t)$ 返回到原规范, 可得到任意态从 $|\psi(0)\rangle$ 到 $|\psi(t)\rangle$ 的时间演化算符

$$|\psi(t)\rangle == \hat{\mathcal{U}}(t,0)|\psi(0)\rangle \tag{4.7.12}$$

时间演化幺正算符是

$$\hat{\mathcal{U}}(t,0) = \hat{U}^\dagger(t)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial\tau}\hat{U}^\dagger+\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger]\mathrm{d}\tau}\hat{U}(0) \tag{4.7.13}$$

4.7.3 $SU(2)$ 和 $SU(1,1)$ 含时系统精确解和几何相位

考虑含时系统的 Hamilton 算符是 $SU(2)$ 或者 $SU(1,1)$ Lie 代数生成元 (basis elements) 线性组合，形式为

$$\hat{H} = E\hat{K}_0 + G[\hat{K}_+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(t)} + \hat{K}_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(t)}] \tag{4.7.14}$$

生成元算符对易关系是

$$[\hat{K}_0, \hat{K}_\pm] = \pm\hat{K}_\pm, [\hat{K}_+, \hat{K}_-] = D\hat{K}_0 \tag{4.7.15}$$

其中

$$D = \pm 2$$

分别表示 $SU(2)$ 和 $SU(1,1)$ Lie 代数生成元对易关系。该 Hamilton 算符有实际意义: 对于 $SU(2)$ 系统，把生成元看成相应的自旋算符，而 $E = \mu B\cos\theta, G = \mu B\sin\theta$, μ 是耦合系数 (这里是自旋磁矩)，则 Hamilton 算符描述绕 z 轴旋转的磁场 (图 4.7.1)

$$\boldsymbol{B} = B(\sin\theta\cos\varphi(t), \sin\theta\sin\varphi(t), \cos\varphi(t)) \tag{4.7.16}$$

中的自旋，需要强调的是，用含时规范方法可以处理任意高自旋系统。

$SU(1,1)$ 对易关系的 Hamilton 则可描述一个含时谐振子。引入 Bose 产生、湮灭算符，并令

$$\hat{K}_0 = \frac{1}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

$$\hat{K}_+ = \frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger)^2, \quad \hat{K}_- = \frac{1}{2}(\hat{a})^2, \tag{4.7.17}$$

该 Hamilton 算符可用来研究 $SU(1,1)$ 相干态及其压缩特性。

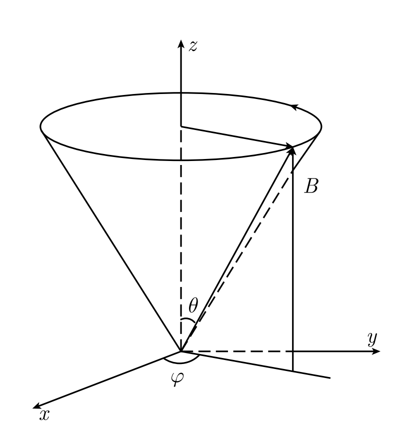


图 4.7.1　绕 z 轴的旋转磁场

我们构造如下的含时幺正算符：

$$\hat{U} = \mathrm{e}^{\frac{-\eta}{2}(\hat{K}_+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(t)} - \hat{K}_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(t)})} \tag{4.7.18}$$

其中, η 是待定系数。用对易关系

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{K}_+\hat{U}^\dagger = &\hat{K}_+\cos^2\frac{\lambda}{4}\eta - \hat{K}_-\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\varphi(t)}\sin^2\frac{\lambda}{4}\eta \\ &-\frac{D}{\lambda}\hat{K}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(t)}\sin\frac{\lambda}{2}\eta\end{aligned} \tag{4.7.19}$$

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{K}_-\hat{U}^\dagger = &\hat{K}_-\cos^2\frac{\lambda}{4}\eta - \hat{K}_+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi(t)}\sin^2\frac{\lambda}{4}\eta \\ &-\frac{D}{\lambda}\hat{K}_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(t)}\sin\frac{\lambda}{2}\eta\end{aligned} \tag{4.7.20}$$

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{K}_0\hat{U}^\dagger = &\hat{K}_0\cos\frac{\lambda}{2}\eta \\ &+\frac{1}{\lambda}(\hat{K}_+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(t)} + \hat{K}_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(t)})\sin\frac{\lambda}{2}\eta\end{aligned} \tag{4.7.21}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hat{U}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger = &2\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}\hat{K}_0\sin^2\frac{\lambda}{4}\eta \\ &-\frac{\mathrm{d}\varphi}{\lambda\mathrm{d}t}\sin\frac{\lambda}{2}\eta(\hat{K}_+\mathrm{e}^{\varphi} + \hat{K}_-\mathrm{e}^{\varphi})\end{aligned} \tag{4.7.22}$$

并考虑周期含时系统，$\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = \omega$ 是常数，只要待定参数满足以下方程：

$$G\cos\frac{\lambda\eta}{2} - \frac{E+\hbar\omega}{\lambda}\sin\frac{\lambda\eta}{2} \tag{4.7.23}$$

即

$$\cos\frac{\lambda\eta}{2}=\pm\frac{E+\hbar\omega}{\sqrt{G^2+(E+\hbar\omega)^2}} \tag{4.7.24}$$

新规范中的 Hamilton 算符则变为

$$\hat{H}'=\varOmega\hat{K}_0 \tag{4.7.25}$$

其中

$$\varOmega=\pm\frac{(\omega_0+\hbar\omega)^2+2DG^2}{\sqrt{G^2+(\omega_0+\hbar\omega)^2}}-\hbar\omega \tag{4.7.26}$$

是常数。

我们来求几何相位，假定 $|n\rangle$ 是 $\hat{K}_0$ 的本征态

$$\hat{K}_0|n\rangle=k_n|n\rangle \tag{4.7.27}$$

由于在新规范中，Hamilton 算符不显含时间，含时 Schrödinger 方程的通解显然是

$$|\psi'(t)\rangle=\sum_n c_n\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}k_n\varOmega t}|n\rangle \tag{4.7.28}$$

回到原规范

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n c_n\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\langle n|\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger-\mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{U}^\dagger|n\rangle\mathrm{d}\tau}\hat{U}^\dagger|n\rangle \tag{4.7.29}$$

演化一个周期后的几何相位可用前面的对易关系 (4.7.22) 求得为

$$\gamma_n=\mathrm{i}\int_0^T\left\langle n\left|\hat{U}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger\right|n\right\rangle\mathrm{d}t \tag{4.7.30}$$

$$=2\pi k_n\left(1\mp\frac{E+\hbar\omega}{\sqrt{G^2+(E+\hbar\omega)^2}}\right) \tag{4.7.31}$$

对于 $SU(2)$ 自旋系统，在绝热近似下 $(\omega=0)$，我们的精确结果和文献中的完全一致。

作业 4.2 用方程 (4.7.18) 的幺正算符构造一个厄米不变量

$$\hat{I}(t)=\hat{U}\hat{K}_0\hat{U}^\dagger$$

4.8 量子化光场中二能级原子的几何相位 —— 含时规范变换的应用

单模光场中的二能级原子在旋波近似下的 Hamilton 量是

$$\hat{H}'=\sum_{i=1}^2\omega_i\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i+\varOmega\left(\hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1\hat{b}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2\hat{b}^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right) \tag{4.8.1}$$

我们取自然单位 $\hbar = 1$，应该说明, 这一二次量子化的 Hamilton 算符描述的是外场中的原子，把原子看成一孤立系统，和光场 (外场) 有能量交换，因而 Hamilton 含时，不是守恒量，二次量子化 Hamilton 算符的推导见 4.10 节。$\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ 和 $\hat{b}, \hat{b}^\dagger$ 分别是原子和光子的产生、湮灭算符，满足通常的 Bose 子对易关系。

引入赝自旋算符表示原子能级的产生和湮灭算符

$$\begin{aligned}\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 &= \hat{\sigma}_+ \\ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 &= \hat{\sigma}_- \\ \hat{\sigma}_z &= \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1\end{aligned} \tag{4.8.2}$$

Hamilton 算符变为

$$\hat{H}' = \frac{\omega_0}{2}\hat{\sigma}_z + \Omega\left(\hat{\sigma}_+ \hat{b} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \hat{\sigma}_- \hat{b}^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right) \tag{4.8.3}$$

其中

$$\omega_0 = \omega_2 - \omega_1$$

含时 Schrödinger 方程记为

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi'\right\rangle = \hat{H}'\left|\psi'\right\rangle \tag{4.8.4}$$

4.8.1 含时规范变换和规范选取的意义

作含时规范变换

$$\left|\psi'\right\rangle = \hat{U}^\dagger(t)\left|\psi\right\rangle$$

含时幺正算符选为

$$\hat{U}(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega \hat{b}^\dagger \hat{b} t} \tag{4.8.5}$$

代入 Schrödinger 方程 (4.8.4) 得

$$\mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger\right)\left|\psi\right\rangle + \mathrm{i}\hat{U}^\dagger \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi\right\rangle = \hat{H}'\hat{U}^\dagger\left|\psi\right\rangle$$

两边同乘 $\hat{U}$ Schrödinger 方程变为

$$\mathrm{i}\hat{U}\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger\right)\left|\psi\right\rangle + \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi\right\rangle = \hat{U}\hat{H}'\hat{U}^\dagger\left|\psi\right\rangle$$

在新规范中 Hamilton 算符变为

$$\hat{H} = \hat{U}\hat{H}'\hat{U}^\dagger - \mathrm{i}\hat{U}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger$$

作业 4.3 证明

$$\hat{U}\hat{b}\hat{U}^\dagger = \hat{b}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}, \quad \hat{U}\hat{b}^\dagger\hat{U}^\dagger = \hat{b}^\dagger \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

我们得到了在文献中的 J-C 模型 Hamilton 算符

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \Omega\left(\hat{\sigma}_+\hat{b} + \hat{\sigma}_-\hat{b}^\dagger\right) \tag{4.8.6}$$

$$\hat{H}_0 = \omega\hat{b}^\dagger\hat{b} + \frac{\omega_0}{2}\hat{\sigma}_z$$

新规范的物理意义很明确，是把原子和光场一起看成一个孤立系统，在这一系统中能量守恒的 Hamilton 量是好量子数。另外，作一幺正算符是

$$\hat{U}_I = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t}$$

的含时规范变换，我们也可得到相互作用绘景中的 Hamilton 算符

$$\hat{H}_I = \Omega\left(\hat{\sigma}_+\hat{b}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_0-\omega)t} + \hat{\sigma}_-\hat{b}^\dagger\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega_0-\omega)t}\right) \tag{4.8.7}$$

4.8.2　J-C 模型的 Berry 相

若 $|E_0\rangle$ 是系统的能量本征态，不失一般性，假设是基态

$$\hat{H}|E_0\rangle = E_0|E_0\rangle \tag{4.8.8}$$

含时 Schrödinger 方程的特解是

$$\begin{aligned}|\psi_0(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0 t}|E_0\rangle \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_0^t\langle E_0|\hat{U}\hat{H}'\hat{U}^\dagger|E_0\rangle\mathrm{d}\tau+\mathrm{i}\gamma(t)}|E_0\rangle\end{aligned} \tag{4.8.9}$$

其中

$$\gamma(t) = -\mathrm{i}\int_0^t\left\langle E_0\left|\hat{U}\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{U}^\dagger\right|E_0\right\rangle\mathrm{d}\tau \tag{4.8.10}$$

演化一个周期

$$T = \frac{2\pi}{\omega}$$

后几何相位是

$$\begin{aligned}\gamma(T) &= \int_0^T\omega\langle E_0|\hat{b}^\dagger\hat{b}|E_0\rangle\mathrm{d}t \\ &= 2\pi\langle E_0|\hat{b}^+\hat{b}|E_0\rangle\end{aligned} \tag{4.8.11}$$

该相位有明确的拓扑意义，因为

$$\omega = \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$$

则

$$\int_0^T\omega\mathrm{d}t = \oint\mathrm{d}\varphi = 2\pi \tag{4.8.12}$$

我们再次见到了这一封闭的但不确定的联络一次式，它是导致反常和乐的原因，如果前面的系数，这儿是 $\langle E_0|\hat{b}^+\hat{b}|E_0\rangle$，是非整数的话。

4.9 简并态几何相位和非 Abel 规范场

4.9.1 简并态几何相

Wilczek 最早把 Berry 提出的非简并态几何相位理论推广到非简并态，并且指出参数空间的等效矢量势是非 Abel 规范场，把 $U(1)$ 厄米丛推广到 $U(N)$ 情况。近年来, 在光学和凝聚态系统中实现非 Abel 规范场已成为一热点研究课题。考虑多重参数 $\boldsymbol{R}(t)$ 含时的 Hamilton $\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))$，它有 N 个含时简并基态 $|n(t)\rangle$。Schrödinger 方程的一般基态解是简并基态的叠加

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n(t)|n(t)\rangle \tag{4.9.1}$$

代入含时 Schrödinger 方程，我们把基态能量设为零，把 N 个系数排成列矩阵，则得到

$$\psi(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(t)}\psi(0) \tag{4.9.2}$$

其中

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{pmatrix}$$

是旋量，$\psi(0)$ 表示其初始旋量态。假定经过一长时间 T 后, 参数回到其初始值 $\boldsymbol{R}(T) = \boldsymbol{R}(0)$，几何相位只依赖于参数空间的迴路 c

$$\gamma = \oint_c \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{R} \tag{4.9.3}$$

$\boldsymbol{A}$ 是参数空间矢量场矩阵，矩阵元定义为

$$\boldsymbol{A}_{m,n} = \mathrm{i}\langle m(\boldsymbol{R})|\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}}|n(\boldsymbol{R})\rangle \tag{4.9.4}$$

$\boldsymbol{A}$ 是非 Abel 规范场。

4.9.2 自旋相干态和非 Abel 规范场的分子磁体实现

1. 单轴各向异性的分子磁体模型

考虑单轴各向异性的分子磁体 (有关分子磁体模型的更多内容参看本书第 5 章)，例如 Mn_{12}, 其 Hamilton 算符可表示为

$$\hat{H} = -K\hat{S}_z^2 \tag{4.9.5}$$

$K > 0$ 是能量量纲常数，而 $\hat{S}$ 是无量纲自旋算符，自旋量子数为 “s”。Hamilton 有时间反演不变性，显然有简并基态 $|s, \pm s\rangle$, 即

$$\hat{S}_z|s, \pm s\rangle = \pm s|s, \pm s\rangle$$

我们可通过一空间坐标转动，使分子磁体的易磁化方向转到单位矢量为

$$\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$$

的空间方向，这时两简并基态变为

$$\boldsymbol{n}\cdot\hat{S}|\pm\boldsymbol{n}\rangle = \pm s|\pm\boldsymbol{n}\rangle \tag{4.9.6}$$

$|\pm\boldsymbol{n}\rangle$ 称为自旋相干态。空间旋转幺正算符不难求得为

$$\hat{U} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\hat{S}_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\hat{S}_y}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi\hat{S}_z} = \mathrm{e}^{-\frac{\theta}{2}(\hat{S}_+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}-\hat{S}_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi})} \tag{4.9.7}$$

即

$$|\pm\boldsymbol{n}\rangle = \hat{U}|s, \pm s\rangle \tag{4.9.8}$$

把简并基态的能量设为零，用对易关系

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hat{U}\nabla\hat{U}^\dagger = {}& 2\frac{1-\cos\theta}{R\sin\theta}\boldsymbol{e}_\varphi\hat{S}_z + \left(-\mathrm{i}\frac{1}{2R}\boldsymbol{e}_\theta + \frac{1}{2R}\boldsymbol{e}_\varphi\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\hat{S}_+ \\ &+ \left(\mathrm{i}\frac{1}{2R}\boldsymbol{e}_\theta + \frac{1}{2R}\boldsymbol{e}_\varphi\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\hat{S}_-\end{aligned} \tag{4.9.9}$$

和非 Abel 规范场表达式 (4.9.4), 不难得到非 Abel 规范场 2×2 矩阵的明显表达式，对于高自旋分子磁体，矩阵都是对角的。仅当自旋量子数 $s = 1/2$ 时，(当然这已不是分子磁体了，Hamilton 算符也变为平庸的常数)，我们能得到非对角的非 Abel 规范场矩阵

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2R}\begin{pmatrix} \dfrac{1-\cos\theta}{\sin\theta}\boldsymbol{e}_\varphi & \dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}}{2}(\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}\pi}{2}}\boldsymbol{e}_\theta - \boldsymbol{e}_\varphi) \\ \dfrac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}}{2}(\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\pi}{2}}\boldsymbol{e}_\theta - \boldsymbol{e}_\varphi) & -\dfrac{1-\cos\theta}{\sin\theta}\boldsymbol{e}_\varphi \end{pmatrix} \tag{4.9.10}$$

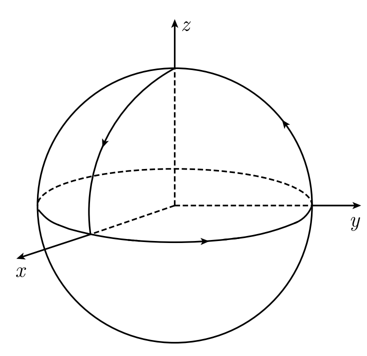


图 4.9.1　非 Abel 几何相积分路径

沿图 4.9.1 所示参数演化路径：$\boldsymbol{n}$ 的端点在球面上从北极开始沿子午圈向下到赤道，向东转 $\dfrac{\pi}{2}$, 沿经度线向上返回北极。几何相可直接计算为

$$\gamma = \oint \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R} = \frac{\pi}{4}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \tag{4.9.11}$$

我们形式上得到了矩阵几何相位，它不可能是物理观测量，能测的量也许是其本征值。

2. 双轴各向异性分子磁体模型

用单轴各向异性分子磁体模型，我们得到了 2×2 矩阵非 Abel 规范场, 高自旋的规范场矩阵都是对角的。高自旋非对角矩阵规范场可用双轴各向异性分子磁体模型实现。双轴各向异性分子磁体 Fe_8 的模型 Hamilton 算符可写为

$$\hat{H} = K_1 \hat{S}_z^2 + K_2 \hat{S}_y^2 \tag{4.9.12}$$

各向异性参数满足条件

$$K_1 > K_2 > 0$$

z 轴是难磁化轴，x 是易轴。半整数自旋分子磁体有两个简并基态

$$\hat{H}|M_\pm\rangle = E_0|M_\pm\rangle$$

对于有限的自旋量子数 “s”, 不难得到简并基态的解析解

$$|M_\pm\rangle = \sum_{m=-s}^{s} c_m^\pm |s, m\rangle \tag{4.9.13}$$

用方程 (4.9.7) 定义的幺正算符作幺正变换，也即旋转坐标系

$$|M_\pm(\boldsymbol{R})\rangle = \hat{U}|M_\pm\rangle, \quad \hat{H}(\boldsymbol{R}) = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger \tag{4.9.14}$$

则 2×2 非 Abel 规范场矩阵可由方程 (4.9.4) 计算。

作业 4.4 求 $s = \dfrac{3}{2}$ 的非 Abel 矩阵规范场。

4.10 附录：量子化光场中的二能级原子 Hamilton 算符

从场论的观点，我们把电子在经典电磁场中的 Schrödinger 方程看作经典场方程，电子的波函数就变成了经典场变量，它和电磁场具有相同的地位。所研究系统的物理观测量是矢量场 $\boldsymbol{A}$ 和复标量场 ψ，经典场方程是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{e\boldsymbol{A}}{c\hbar}\right)^2 + V\right]\psi \tag{4.10.1}$$

V 是电子的标量势。我们用正则量子化方法，把这一经典场系统量子化。复标量场有两个独立场变量 ψ 和 ψ^*, 拉氏密度可构造为

$$\mathcal{L} = \mathrm{i}\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi^*\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\nabla - \mathrm{i}\frac{e\boldsymbol{A}}{c\hbar}\right)^2 + V\right]\psi \tag{4.10.2}$$

作用量变分取极值

$$\delta S=\delta\int\mathcal{L}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{d}t=0$$

两独立场变量 ψ 和 ψ^* 变分前的系数为零，则分别得到 Schrödinger 方程及其厄米共轭。引入和场变量 ψ 共轭的正则动量密度

$$\pi_\psi=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dfrac{\partial\psi}{\partial t}}=\mathrm{i}\hbar\psi^* \tag{4.10.3}$$

注意到这一变换并没有给出期待的正则动量和广义速度 $\dfrac{\partial\psi}{\partial t}$ 之间的关系式，以使我们可以用动量密度来表示广义速度，从而得到相空间 Hamilton 密度。上面的关系式仅是两场变量间的约束关系，称这样的系统为约束系统，其量子化应采用 Dirac 约束系统量子化方法，有兴趣的读者可参阅相关文献。我们这里可形式上用 Hamilton 密度的定义

$$\mathcal{H}=\frac{\partial\psi}{\partial t}\pi_\psi-\mathcal{L}=\psi^*\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\mathrm{i}\frac{e\boldsymbol{A}}{c\hbar}\right)^2+V\right]\psi \tag{4.10.4}$$

所幸广义速度正好消掉。

系统总 Hamilton 量是 Hamilton 密度的空间积分

$$H=\int\psi^*\mathcal{H}\psi\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{4.10.5}$$

用正则量子化方法，把场变量 (物理观测量) 及其共轭变量、(动量密度) 变为算符，对易关系是

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\hat{\pi}_\psi(\boldsymbol{x}',t)]=\mathrm{i}\hbar\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{4.10.6}$$

$$[\hat{A}^i(\boldsymbol{x},t),\hat{\pi}^j_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x}'t)]=\mathrm{i}\hbar\delta_{i,j}\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{4.10.7}$$

量子化光场中的原子二次量子化 Hamilton 算符可写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_i \tag{4.10.8}$$

第一项表示原子算符，第二项是原子和光场相互作用

$$\hat{H}_0=\int\hat{\psi}^\dagger\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\hat{\psi}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{4.10.9}$$

和

$$\hat{H}_i=-\frac{e\hbar}{mc}\int\hat{\psi}^\dagger\hat{A}\cdot\boldsymbol{p}\hat{\psi}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{4.10.10}$$

相互作用 Hamilton 中使用了 Coulomb 规范 $\nabla\cdot\hat{A}=0$ (也即横波条件)，另外，忽略了 $\hat{A}^2$ 项。把原子场算符按电子束缚态展开

$$\hat{\psi}=\sum_n \hat{a}_n u_n,\quad \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)u_n=E_n u_n \tag{4.10.11}$$

用本征态 u_n 的正交规一性, 得到

$$\hat{H}_0=\sum_n E_n\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n \tag{4.10.12}$$

原子产生、湮灭算符满足 Bose 子对易关系。

作业 4.5 证明由原子场算符的对易关系方程 (4.10.6) 推出原子产生、湮灭算符满足的 Bose 子对易关系

$$[\hat{a}_n,\hat{a}_m^\dagger]=\delta_{n,m}$$

反之亦然。

把电磁场算符按自由场平面波展开

$$\hat{A}=\sum_{k,\alpha}\xi_k(\hat{b}_{k,\alpha}\boldsymbol{e}_\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega_k t)}+\hat{b}_{k,\alpha}^\dagger\boldsymbol{e}_\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega_k t)}) \tag{4.10.13}$$

$\hat{b}$ 是无量纲算符，ξ_k 是常数，$\boldsymbol{e}_\alpha$ 是和传播方向 $\boldsymbol{k}$ 垂直的单位矢量, $\alpha=1,2$ 表示互相垂直的极化方向。同样用电磁场算符的对易关系，注意到平面波正交规一性，不难证明光子算符的对易关系

$$[\hat{b}_{k,\alpha},\hat{b}_{k',\alpha'}^\dagger]=\delta_{k,k'}\delta_{\alpha,\alpha'} \tag{4.10.14}$$

用长波近似 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\approx 0$，得到在单模光场中二能级原子的相互作用 Hamilton

$$\hat{H}_i=\frac{\mathrm{i}e\varOmega'}{c}[\hat{A}\cdot\boldsymbol{x}_{12}\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2-\hat{A}\cdot\boldsymbol{x}_{12}^*\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger] \tag{4.10.15}$$

$$\varOmega'=\frac{E_2-E_1}{\hbar}$$

是频率量纲的耦合常数。

$$\boldsymbol{x}_{12}=\langle u_1|\boldsymbol{x}|u_2\rangle$$

是偶极跃迁矩阵元, 令

$$\frac{e\xi}{c}\sum_\alpha \boldsymbol{e}_\alpha\cdot\boldsymbol{x}_{12}=-\mathrm{i}g$$

其中, g 是实参数, 光子的产生、湮灭和极化无关, 我们得到相互作用 Hamilton 算符

$$\hat{H}_i=g\varOmega'[\hat{b}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\hat{b}^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}][\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2+\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger] \tag{4.10.16}$$

我们强调，在原子孤立系统中或者规范中，Hamilton 是含时的。旋波近似下，只选能量守恒的过程, 重新定义参数 $\Omega = \Omega' g$，则有

$$\hat{H}_i = \Omega[\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{b} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \hat{a}_2 \hat{a}_1^\dagger \hat{b}^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}] \tag{4.10.17}$$

Ω 称为 Rabi 频率。

参 考 文 献

Aharonov Y, Anandan J. 1987. Phase change during a cyclic quantum evolution. Phys. Rev. Lett., 58: 1953

Balachandran A P. 1989. Classical topology and quantum phases: quantum Mechanics; Sudarshan E C G. Topology and Quantum 7 Internal Symmetries in Nonlinear Field Theory, in Geometrical and Algebraic Aspects of Nonlinear Field Theories. North-Holland

Berry M V R. 1984. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. Proc. Soc., A392: 45

Bohm A, Mostafazadeh A, Koizumi H, et al. 2003. The Geometric Phase in Quantum Systems-Foundations, Mathematical Concepts, and Applications in Molecular and Condensed Matter Physics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg

Burke W L. 1987. Applied Differential Geometry. Cambridge Univ. Press

Chang M C, Niu Q. 1995. Berry phase, hyperorbits, and the hofstadter spectrum. Phys. Rev. Lett., 75: 1348

Chen G, He M M, Xu C T, Liang J Q. 2006. Berry phase of nuclear spins in GaAs semiconductor. Phys. Lett. A, 359: 138～142

Chen G, Li J, Liang J Q. 2006. Critical property of the geometric phase in the Dicke model. Phys. Rev. A, 74: 054101

Chen Z D, Liang J Q, Shen S Q, et al. 1995. Dynamics and Berry phase of two-species Bose-Einstein condensates. Phys. Rev. A, 69: 023611

He M M, Chen G, Liang J Q. 2007. Berry phase in taviscummings model. Eur. Phys. J. D, 44: 581～583

Isham C J. 1984. Topological and global aspects of quantum theory. in Relativity, Groups and Topology II. (Les Houches Session XI). North-Holland

Jin Y H, Li Z J, Liang J Q. 2002. Berry Phase in an effective SU(1,1) system. Mod. Phys. Lett. B, 16: 783

Lai Y Z, Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1995. Time evolution of quantum systems with time-dependent Hamiltonian and the invariant Hermitian operator. J. Phys. A, 29: 1773

Lai Y Z, Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1995. Timedependent quantum systems and the invariant Hermitian operator. Phys. Rev. A, 53: 3691

Lewis H R, Riesenfeld W B. 1969. An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field. J. Math. Phys., 10: 1458

Lewis H R. 1968. Class of exact invariants for classical and quantum time-dependent harmonic oscillators. J. Math. Phys., 9: 1976

Li L, Li B Z, Liang J Q. 2001. Lewis-Riesenfeld phases and Berry phases in the quantum system of time-dependent harmonic oscillator with a moving boundary. Acta. Phys. Sin., 50: 2077

Li Z J, Cheng J G, Liang J Q. 2000. Time evolution and Berry Physes of a time-dependent oscillator in finite dimensional Hilbert space. Acta Physica Sinica, 49: No.1, 11

Liang J Q, Ding X X. 1999. Broken gauge equivalence of Hamiltonians due to time-evolution and Berry's phase. Phys. Lett. A, 153: 273

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1992. Time-dependent gauge transformations and Berry's phase. Ann. Phys., 219: 42

Liang J Q. 1992. Quantum anholonomy and geometrical phase interference. Mod I J. Phys., A7: 4747～4755

Simo B. 1983. Holonomy, the quantum adiabatic theorem, and 10 Berry's phase. Phys. Rev. Lett., 51: 2167

Sundaram G, Niu Q. 1999. Berry phase, wave packet dynamics in slowly perturbed crystals: energy gradient correction and berry phase effects. Phys. Rev. B, 59: 14195

Thouless D, Kohmoto M, Nightingale N, et al. 1982. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. Phys. Rev. Lett., 49: 405

Wei L F, Liang J Q, Li B Z. 1995. Gauge independence of Lewis Riesenfeld phases. Nuovo Cimento 110B

Wilczek F, Zee A. 1983. Appearance of gauge structure in simple dynamical systems. Phys. Rev. Lett., 51: 2250

Wilczek F, Zee A. 1984. Appearance of gauge structure in simple dynamical systems. Phys. Rev. Lett., 52: 211

Xu C T, Liang J Q. 2006. Dynamics and geometric phase of two spins with exchange coupling in a rotating magnetic field. Phys. Lett. A, 356: 206～209

第 5 章　路径积分，量子隧穿的瞬子方法和宏观量子效应

量子力学是支配物质世界运动和变化规律的基本法则，而描述宏观现象的经典力学一般来说只是量子力学在宏观尺度下的近似。宏观态是大量微观态的统计平均, 量子相干性已不复存在, 因而遵从宏观规律, 通常宏观系统的量子效应并不显著，但在特定的系统中量子现象也可在宏观尺度下表现出来，称为宏观量子效应。例如，超导体中的 Josephson 隧穿，液氦中的超流动性，以及 Bose-Einstein 凝聚等都是众所周知的宏观量子效应例子。研究宏观态量子效应的理论意义在于了解量子力学原理适用的极限, 也有实际的应用价值, 如开发和制造量子器件。许多情况下, 宏观量子现象都伴随量子隧道效应，它的定量计算基于虚时路径积分，即瞬子方法。本章简单介绍路径积分量子化理论体系和计算方法，着重于量子隧道的瞬子方法及在分子磁体宏观量子效应中的应用。本章瞬子方法的理论体系实际上就是 $(1+1)$ 维 ϕ^4 场理论。

5.1　量子力学的路径积分

把正则变量换为算符，并赋予对易关系，称为正则量子化或者算符量子化，把物理观测量变为算符，是其核心。Feynman 提出另外的量子化方案，无须算符概念。其基本思想是：经典粒子从一个时空点到另一个时空点的运动沿固定路径，即作用量最小的路径，而对量子系统来说，所有可能的路径都对几率幅有贡献，结果是对所有路径积分，这也是路径积分名称的由来。在这一量子化方案中没有引入算符，仍然使用经典量，即 C- 数。路径积分是独立的量子化理论，无须借助正则量子化的概念和符号系统。后来, 人们证明了两种量子化理论的一致性。从教学的观点，我们从熟悉的正则量子化 Schrödinger 方程“推导出”路径积分传播子，及其基本的计算方法。路径积分已变成近代场论的强有力工具, 在量子力学的隧道效应和宏观量子现象研究中也有重要的应用。

5.1.1　传播子的定义和基本特性

1. 传播子的定义

从量子力学态的时间演化着手，对已知 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 的系统，假定时间 $t_{\rm i}$

时的态是 $|\psi(t_\mathrm{i})\rangle$，演化到时间 t_f 的态可用时间演化算符得到

$$|\psi(t_\mathrm{f})\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t_\mathrm{f}-t_\mathrm{i})}|\psi(t_\mathrm{i})\rangle \tag{5.1.1}$$

投影到坐标表象，插入坐标表象完备性关系

$$\langle x_\mathrm{f}|\psi(t_\mathrm{f})\rangle = \psi(x_\mathrm{f},t_\mathrm{f}) = \int K(x_\mathrm{f},t_\mathrm{f};x_\mathrm{i},t_\mathrm{i})\psi(x_\mathrm{i},t_\mathrm{i})\mathrm{d}x_\mathrm{i} \tag{5.1.2}$$

其中

$$\begin{aligned}K(x_\mathrm{f},t_\mathrm{f};x_\mathrm{i},t_\mathrm{i}) &= \langle x_\mathrm{f}|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t_\mathrm{f}-t_\mathrm{i})}|x_\mathrm{i}\rangle \\ &= \langle x_\mathrm{f},t_\mathrm{f}|x_\mathrm{i},t_\mathrm{i}\rangle\end{aligned} \tag{5.1.3}$$

称为路径积分传播子，或者积分核，它是两时空点间的坐标基矢几率幅，是路径积分理论的核心，它包含了系统的基本物理：给了初始波函数 $\psi(x_\mathrm{i},t_\mathrm{i})$，时空点 $(t_\mathrm{f},x_\mathrm{f})$ 的波函数 $\psi(x_\mathrm{f},t_\mathrm{f})$ 完全由传播子确定。由传播子的定义，很容易证明其具有如下特性。

2. 传播子的基本特性

(1)

$$K^*(x_\mathrm{f},t_\mathrm{f};x_\mathrm{i},t_\mathrm{i}) = K(x_\mathrm{i},t_\mathrm{i};x_\mathrm{f},t_\mathrm{f}) \tag{5.1.4}$$

(2)

$$K(x_\mathrm{f},t;x_\mathrm{i},t) = \delta(x_\mathrm{f}-x_\mathrm{i}) \tag{5.1.5}$$

(3) 传播子有群结构, 用传播子内积定义，插入坐标基矢完备性关系，立即得到

$$K(x_3,t_3;x_1,t_1) = \int K(x_3,t_3;x_2,t_2)K(x_2,t_2;x_1,t_1)\mathrm{d}x_2 \tag{5.1.6}$$

$K^*(x_\mathrm{f},t_\mathrm{f};x_\mathrm{i},t_\mathrm{i})$ 是 $K(x_\mathrm{f},t_\mathrm{f};x_\mathrm{i},t_\mathrm{i})$ 的逆, 反之亦然。

(4) 传播子满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial K(x,t;x_0,t_0)}{\partial t} = \hat{H}K(x,t;x_0,t_0) \tag{5.1.7}$$

3. 本征波函数表示

在传播子的几率幅表示中插入算符本征态完备关系，即得到传播子的本征波函数表示, 例如, ψ_n 是 Hamilton 算符的本征态

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

则

$$K(x_\mathrm{f},t_\mathrm{f};x_\mathrm{i},t_\mathrm{i}) = \sum_n \psi_n^*(x_\mathrm{f})\psi_n(x_\mathrm{i})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t_\mathrm{f}-t_\mathrm{i})} \tag{5.1.8}$$

当 $t_{\mathrm{f}}=t_{\mathrm{i}}$ 时，得到一量子力学中的一个有用关系式

$$\sum_n \psi_n^*(x_{\mathrm{f}})\psi_n(x_{\mathrm{i}})=\delta(x_{\mathrm{f}}-x_{\mathrm{i}}) \tag{5.1.9}$$

本征波函数表示在传播子的计算中，有时起重要作用，特别是精确可解势模型的传播子计算。我们举了 Hamilton 算符的例子, 其实方程 (5.1.9) 对任何算符本征态完备基矢都成立。

4. Green 函数

传播子对传播的时序无限制，即时间的正反向传播均可。Green 函数要求时间正向传播，即只允许时间增大的传播，用公式表示是

$$G(x_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{f}};x_{\mathrm{i}},t_{\mathrm{i}})=K(x_{\mathrm{f}},t_{\mathrm{f}};x_{\mathrm{i}},t_{\mathrm{i}})\Theta(t_{\mathrm{f}}-t_{\mathrm{i}}) \tag{5.1.10}$$

$\Theta(t_{\mathrm{f}}-t_{\mathrm{i}})$ 是通常的跳变函数

$$\Theta(t_{\mathrm{f}}-t_{\mathrm{i}})=\begin{cases}1, & t_{\mathrm{f}}\geqslant t_{\mathrm{i}}\\ 0, & t_{\mathrm{f}}<t_{\mathrm{i}}\end{cases}$$

对 Green 函数求时间导数，并注意到传播子满足 Schrödinger 方程，以及

$$\frac{\mathrm{d}\Theta(t)}{\mathrm{d}t}=\delta(t)$$

我们得到 Green 函数满足的方程

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)G(x,t)=\mathrm{i}\hbar\delta(x)\delta(t) \tag{5.1.11}$$

我们选了时空坐标 $x_{\mathrm{f}}=x,t_{\mathrm{f}}=t;x_{\mathrm{i}}=t_{\mathrm{i}}=0$。

5.1.2　传播子计算

路径积分的基本量是传播子，现介绍其计算方法概要，仍然从时间演化算符出发

$$K(x_{\mathrm{f}},T;x_{\mathrm{i}})=\langle x_{\mathrm{f}}|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}T}|x_{\mathrm{i}}\rangle \tag{5.1.12}$$

把时间 T 分成 N 个无限小的间隔

$$\epsilon=\lim_{N\to\infty}\frac{T}{N}$$

然后在每个无限小时间之间插入完备性关系

$$\int|x\rangle\langle x|\mathrm{d}x=1$$

$$K=\lim_{N\to\infty}\int\left[\prod_{n=1}^{N-1}\mathrm{d}x_n\right]\langle x_\mathrm{f}|x_{N-1},t_{N-1}\rangle\langle x_{N-1},t_{N-1}|$$
$$\cdots|x_n,t_n\rangle\langle x_n,t_n|x_{n-1},t_{n-1}\rangle\cdots\langle x_1,t_1|x_\mathrm{i}\rangle \tag{5.1.13}$$

我们来计算第 n 个无限小的时间几率幅

$$\begin{aligned}&\langle x_n,t_n|x_{n-1},t_{n-1}\rangle=\langle x_n|\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\epsilon}|x_{n-1}\rangle\\&=\int\langle x_n|\mathrm{e}^{-\frac{\hat{H}\epsilon}{2\hbar}}|p_n\rangle\langle p_n|\mathrm{e}^{-\frac{\hat{H}\epsilon}{2\hbar}}|x_{n-1}\rangle\mathrm{d}p_n\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p_n(x_n-x_{n-1})-\epsilon H(p_n,\bar{x}_n)]}\mathrm{d}p_n\end{aligned} \tag{5.1.14}$$

上面的运算中用了动量本征态的完备性关系

$$\int\mathrm{d}p_n|p_n\rangle\langle p_n|=1$$

和动量波函数

$$\langle x|p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$$

注意到 ϵ 是无穷小量, 在略去了高阶小量后, 坐标和动量算符都用其相应的本征值代替, 变为 C- 数，移出矩阵元外, 其中

$$\bar{x}_n=\frac{x_n+x_{n-1}}{2}$$

把每个无限小时间间隔几率幅都算出，则得到相空间传播子

$$\begin{aligned}K(x_\mathrm{f},T;x_\mathrm{i})=&\lim_{N\to\infty}\int\left[\prod_{n=1}^{N-1}\mathrm{d}x_n\right]\left[\prod_{n=1}^{N}\frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi\hbar}\right]\\&\times\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n=1}^{N}\left[p_n\frac{x_n-x_{n-1}}{\epsilon}-H(p_n,\bar{x}_n)\right]\epsilon\right\}\end{aligned} \tag{5.1.15}$$

式 (5.1.15) 常常被简写为

$$K(x_\mathrm{f},T;x_\mathrm{i})=\int\mathcal{D}\{x\}\mathcal{D}\{p\}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{S}} \tag{5.1.16}$$

这里

$$\mathcal{S}=\int_0^T\mathcal{L}p\mathrm{d}t$$

而

$$\mathcal{L}p=p\dot{x}-H(p,x)$$

表示相空间拉氏量。假定 Hamilton 量具有标准的动能加势能形式

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$$

动量积分可积出

$$\int \frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi\hbar} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\left[p_n \frac{xn - x_{n-1}}{\epsilon} - \frac{p^2}{2m} - V(\bar{x}_n)\right]} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\epsilon\hbar}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{xn - x_{n-1}}{\epsilon}\right)^2 - V(\bar{x}_n)\right\}} \tag{5.1.17}$$

完成所有动量积分，得出组态空间传播子表达式

$$\begin{aligned} K(x_{\mathrm{f}}, T; x_{\mathrm{i}}) = & \lim_{N\to\infty} \left\{\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\epsilon\hbar}}\right\}^N \\ & \times \int \mathcal{D}\{x\} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_n \left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon}\right)^2 - V(\bar{x}_n)\right]\epsilon\right\} \end{aligned} \tag{5.1.18}$$

把被积函数 e 指数上的求和变为积分正好是作用量，式 (5.1.18) 的路径积分公式可简写为

$$K(x_{\mathrm{f}}, T; x_{\mathrm{i}}) = \int \mathcal{D}\{x\} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{S}} \tag{5.1.19}$$

其中

$$\mathcal{S} = \int_0^T \mathcal{L} \mathrm{d}x \mathrm{d}t$$

是作用量，$\mathcal{L}$ 是拉氏量。

组态空间路径积分计算如图 5.1.1 所示，给定空间两点 $x_{\mathrm{f}}, x_{\mathrm{i}}$, 要对整个空间路径积分。

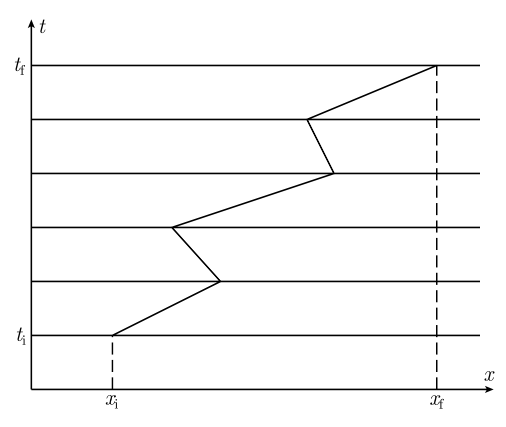


图 5.1.1　路径积分示意图

传播子方程 (5.1.19) 的路径积分表达式仅是一个简化写法，具体计算仍需用前面的求和式，作为一个练习，我们计算拉氏量是

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2$$

的自由粒子传播子, 用方程 (5.1.18) 的表达式, 依次完成 $\mathrm{d}x_1, \mathrm{d}x_2, \cdots$ 从 $-\infty$ 到 ∞ 的积分, 结果是

$$K(x_\mathrm{f}, T; x_\mathrm{i}) = \sqrt{\frac{m}{2\pi \mathrm{i} T\hbar}} \mathrm{e}^{\frac{i(x_\mathrm{f}-x_\mathrm{i})^2 m}{\hbar 2T}} \tag{5.1.20}$$

路径积分能计算的仅有高斯积分，即势能是二次式，例如谐振子势，复杂系统只能用近似方法，方程 (5.1.19) 的表达式提供了一微扰计算方法, 我们下面介绍路径积分定态相位微扰法。

5.1.3 定态相位微扰

虽然路径积分的基本思想是，对于两固定点间的传播几率幅，所有路径都有贡献，需对所有路径的贡献求和，但实际上不是所有路径的贡献完全等价，其中最大贡献来自经典作用量。两点间的作用量按经典路径微扰展开

$$x(t) = x_c(t) + \eta$$

$x_c(t)$ 表示经典路径，而 η 是相对经典路径的偏离

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_c - \int \eta \hat{M} \eta \mathrm{d}t \tag{5.1.21}$$

其中

$$\mathcal{S}_c = \int \left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x_c}{\mathrm{d}t}\right)^2 - V(x_c)\right] \mathrm{d}t$$

是经典作用量，而

$$\hat{M} = \frac{1}{2}\left[m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + \frac{\partial^2 V(x_c)}{\partial x^2}\right] \tag{5.1.22}$$

是二级微扰算符，二级近似的传播子是

$$K(x_\mathrm{f}, T; x_\mathrm{i}) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{S}_c} I \tag{5.1.23}$$

第一个因子是经典作用量的贡献，是零级近似，即熟悉的 WKB 近似。量子扰动贡献一前因子

$$I = \int \mathcal{D}\{\eta\} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int \eta \hat{M} \eta \mathrm{d}t} \tag{5.1.24}$$

已经证明, 势能是二次式的传播子只依赖于经典作用量, 称为 van Vleck-Plauli 公式

$$K(x_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; x_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) = \sqrt{\frac{\mathrm{i}}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S_c}{\partial x_\mathrm{f}\partial x_\mathrm{i}}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_c} \tag{5.1.25}$$

作业 5.1 用 van Vleck-Plauli 公式计算自由粒子传播子。

作业 5.2 用 Feynman 路径积分只能得到在半个周期内成立的一维谐振子传

播子, 返转点有奇异性，称为焦散 (coustics) 拓展到返转点以上，则有一个 Maslov 修正。用谐振子本征波函数和方程 (5.1.8) 求拓展的 Feynman 传播子。

5.2　多连通空间, 自旋的路径积分理论

自旋的路径积分是定义在多连通群流形上的，多连通流形路径积分应考虑同伦 (homotopy) 理论，波函数也是定义在群流形上的。例如，自旋的陀螺球模型的群流形 $SO(3)$ 是双连通的，其经典路径可划归于两个同伦类，分别对应整数和半整数自旋，和 $SO(3)$ 李代数生成元对易关系得出的自旋本征值谱一致。而二维转动群 $SO(2)$ 的群流形是一圆环 S^1，是无穷多连通的, 其基本群的非平庸表示导致分数角动量。群流形 $SO(3)$ 的路径积分理论读者可参阅有关书籍，本书中只讨论 $SO(2)$ 群流形路径积分。

5.2.1　二维多连通空间的路径积分和拓扑相位

我们考虑的流形是二维平面挖去一个洞 Δ，即，$M = R^2 - \Delta$。从时空点 $\boldsymbol{r}_{\rm i}(t_{\rm i})$ 到 $\boldsymbol{r}_{\rm f}(t_{\rm f})$ 的传播子路径积分表示是

$$K(\boldsymbol{r}_{\rm f}, t_{\rm f}; \boldsymbol{r}_{\rm i}, t_{\rm i}) = \int \mathcal{D}(\boldsymbol{r}) {\rm e}^{{\rm i}\int_{t_{\rm i}}^{t_{\rm f}} \mathcal{L}{\rm d}t} \tag{5.2.1}$$

注意, 为简洁起见, 选取自然单位 $\hbar = c = 1$。多连通空间两点间传播子不是唯一确定的，因为从 Δ 的左和右侧通过以及绕不同次数的路径并不等价。多连通空间传播子在其全覆盖空间 M^* 上有无歧义的定义，这里 M^* 类似二维复平面的 Riemann 页 (图 5.2.1)，显然，M^* 上一个点的位置被所在的 Riemann 支页数和页内的位置两个坐标完全确定。

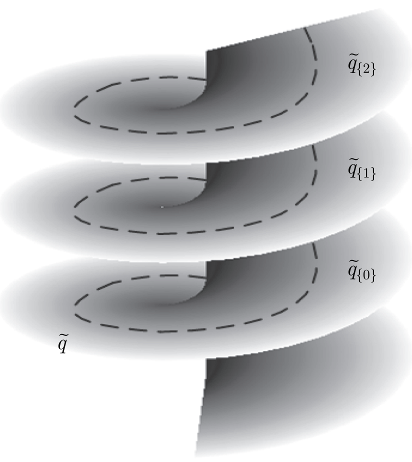


图 5.2.1　全覆盖空间示意图

用

$$K_n(\boldsymbol{r}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{r}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i})$$

表示第 n 个同伦类传播子, 为确定起见我们规定，当 $n>0$ 时，K_n 表示从 $\boldsymbol{r}_\mathrm{i}$ 开始逆时针绕 Δ 旋转 n 次到达 $\boldsymbol{r}_\mathrm{f}$ 的所有路径传播子。而负数 n 则表示顺时针绕，n 称为绕数。第 2 章中已论述，这种路径同伦有群结构，称为基本群 π_1，其群元用 f_n 表示。则基空间 M 传播子应是同伦类传播子的线性叠加

$$K(\boldsymbol{r}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{r}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a(f_n) K_n(\boldsymbol{r}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{r}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) \tag{5.2.2}$$

其中, $a(f_n)$ 是基本群的一维幺正表示，应满足下面关系：

$$|a(f_n)| = 1, \quad a(f_n)a(f_m) = a(f_n f_m) \tag{5.2.3}$$

对于二维多连通空间，不难得出

$$a(f_n) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\delta} \tag{5.2.4}$$

参数 $0 \leqslant \delta < 2\pi$ 和空间坐标及绕数无关。我们证明多连通空间传播子满足两个基本定理。

定理 (一)

对于非平庸表示，即 $\delta \neq 0$，当绕通过 Δ 中心和二维平面垂直的轴旋转 2π 时，传播子增加一相位，和 Bloch 波的格点平移类似。证明非常简单，根据绕数定义，在以 Δ 的中心为原点的平面极坐标 (r, ϕ) 中有关系

$$K_n(r_\mathrm{f}, \phi_\mathrm{f} \pm 2\pi, t_\mathrm{f}; r_\mathrm{i}, \phi_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) = K_{n\pm 1}(r_\mathrm{f}, \phi_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; r_\mathrm{i}, \phi_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) \tag{5.2.5}$$

据此和传播子表达式 (5.2.2)，立即有

$$K(r_\mathrm{f}, \phi_\mathrm{f} \pm 2\pi, t_\mathrm{f}; r_\mathrm{i}, \phi_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) = \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\delta} K(r_\mathrm{f}, \phi_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; r_\mathrm{i}, \phi_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) \tag{5.2.6}$$

定理 (二)

如果同伦类传播子相对于穿过 Δ 中心在平面内的任意轴是对称的, 则退化为平庸表示 $\delta = 0$。假定 $\boldsymbol{r}_\mathrm{f}$ 和 $\boldsymbol{r}_\mathrm{i}$ 分别位于轴线上 Δ 的两边 (图 5.2.2)。

对称关系可表示为

$$K_n(\boldsymbol{r}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{r}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) = K_{-n-1}(\boldsymbol{r}_\mathrm{f}, t_\mathrm{f}; \boldsymbol{r}_\mathrm{i}, t_\mathrm{i}) \tag{5.2.7}$$

这实际上表示传播子具有相对于穿过原点在平面内任意轴的镜像对称性，即空间没有被扭曲。我们可通过改变求和指标 $(n \to -n-1)$ 把传播子改写为

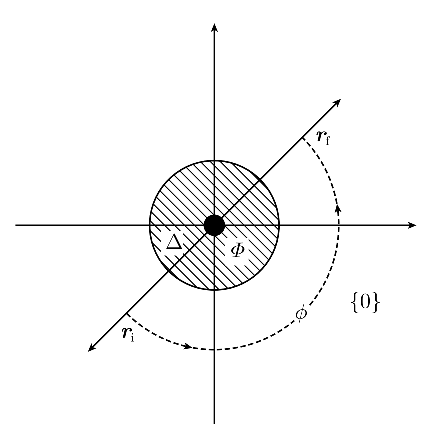


图 5.2.2　$\boldsymbol{r}_\mathrm{f}$ 和 $\boldsymbol{r}_\mathrm{i}$ 的位置示意图

$$K(\boldsymbol{r}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{r}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a(f_{-n-1}) K_{-n-1}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{r}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) \tag{5.2.8}$$

然后用对称关系把 K_{-n-1} 用 K_n 替代，则得到一个新的传播子表达式

$$K = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a'(f_n) K_n \tag{5.2.9}$$

其中新系数是

$$a'(f_n) = a(f_{-n-1}) \tag{5.2.10}$$

它当然也要满足基本群一维幺正表示的特性方程 (5.2.3)，即

$$a'(f_n) a'(f_m) = a'(f_n f_m) = a'(f_{n+m}) \tag{5.2.11}$$

显然公式 (5.2.11) 对任意 m, n 都成立的条件是

$$\delta = 2N\pi \tag{5.2.12}$$

N 是整数或零。所以，若要产生非平庸表示，必须存在使空间扭曲的动力学因素。穿过 Δ 的非整数个量子磁通单位的磁通规范场是使空间扭曲的一种, 但不是唯一的机理。

5.2.2 自由平面转子

我们考虑一个简单的平面转子模型, 约束于半径为 R 的光滑圆环上质量为 μ 的自由运动粒子，或者称为定轴转子模型，以期得到解析的传播子和波函数。定轴转子也即二维自旋模型, 其路径积分量子化, 自然给出二维角动量本征值谱和本征函数。路径积分的优越性是只处理经典量，涉及的是完全确定性的运算，角动量本征值谱和本征函数是唯一确定的，不存在正则量子化中波函数边条件选取的人为因素。系统的拉氏量是

$$L = \frac{1}{2} I \left(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t} \right)^2 \tag{5.2.13}$$

$0 \leqslant \phi < 2\pi$ 是角变量, $I = \mu R^2$ 为转动惯量。传播子是

$$K(\phi, t; 0) = \sum_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\delta} K_n(\phi, t; 0) \tag{5.2.14}$$

这里把初始时间和初始角度都选为 “0”。同伦类传播子的计算可在全覆盖空间 M^* 上进行，对于一维圆环情况，M^* 就像是根弹簧，以绕数标记其圈数。我们把初始位置所在的 Riemann 页标记为零绕数，则 M^* 上的角变量和基空间变量的关系为

$$\tilde{\phi}_n = \phi + 2n\pi \tag{5.2.15}$$

M^* 上的变量定义域是：$-\infty < \tilde{\phi} < \infty$。因而，

$$K_n(\phi,t;0) = \tilde{K}(\tilde{\phi}_n,t;0) \tag{5.2.16}$$

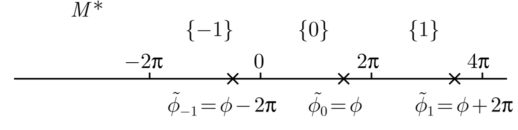
用自由粒子传播子公式 (5.1.20), 立即有

$$\tilde{K}(\tilde{\phi}_n,t;0) = \left[\frac{I}{2\pi \mathrm{i}t}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}I}{2t}\tilde{\phi}_n^2} \tag{5.2.17}$$

基空间第 n 个同伦类传播子则是

$$K_n(\phi,t;0) = \left[\frac{I}{2\pi \mathrm{i}t}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}I}{2t}(\phi+2n\pi)^2} \tag{5.2.18}$$

图 5.2.3 是角度和路径同伦示意图。



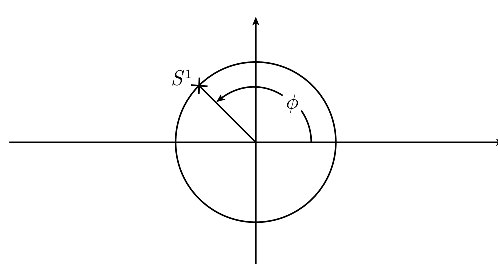


图 5.2.3　S^1 的全覆盖空间 M^* 及角度

下面我们用对称性来确定相因子参数 δ，穿过转轴的平面内直线和圆环相交的两点间的角坐标差是 (逆时针旋转为正，参看图 5.2.2)

$$\phi = \pi \tag{5.2.19}$$

代入同伦类传播子公式，立即可验证

$$K_n = K_{-n-1} \tag{5.2.20}$$

根据多连通空间传播子定理 (二), 相位参数 δ 为零。自由转子传播子当然不可能产生拓扑相位。对所有同伦类传播子求和则得到

$$K(\phi,t;0) = \left[\frac{I}{2\pi \mathrm{i}t}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}I\phi^2}{2t}} \Theta_3\left[\frac{I\pi\phi}{t},\frac{2\pi I}{t}\right] \tag{5.2.21}$$

其中

$$\Theta_3(z,y) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi y n^2+\mathrm{i}2nz} \tag{5.2.22}$$

是 Jacobi Θ 函数。根据传播子的本征波函数表示

$$K(\phi,t;0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \psi_m(\phi)\psi_m^*(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m t} \tag{5.2.23}$$

应用 Jacobi 变换

$$\Theta_3(z,y) = (-\mathrm{i}y)^{-\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{z^2}{\mathrm{i}\pi y}}\,\Theta_3\left(-\frac{z}{y},-\frac{1}{y}\right) \tag{5.2.24}$$

可唯一地确定本征波函数和能量本征值

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}, \quad E_m = \frac{m^2}{2I} \tag{5.2.25}$$

我们得到了通常的整数角动量量子化和 2π 周期波函数。

5.2.3 旋转坐标系中的平面转子——非平庸拓扑相位的简单模型, 分数角动量

为得到可产生非零参数 δ 的物理模型, 我们考虑以角速度 ω 旋转的圆环上的粒子动力学。在随圆环转动的坐标系中的角变量与实验室坐标系的关系 (非相对论近似) 是

$$\beta = \phi - \omega t, \quad \dot\beta = \dot\phi - \omega \tag{5.2.26}$$

转动系中拉氏量变为

$$L = \frac{I}{2}(\dot\beta+\omega)^2 = \frac{I}{2}\dot\beta^2 + I\omega\dot\beta + \frac{I\omega^2}{2} \tag{5.2.27}$$

只要把前面自由转子传播子公式 (5.2.18) 中的角变量作替换 $\phi = \beta + \omega t$, 则得出旋转系中第 n 个同伦类传播子

$$K_n = \left[\frac{I}{2\pi\mathrm{i}t}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}I}{2T}(\beta+2n\pi)^2+\mathrm{i}\gamma(\beta+2n\pi)+\frac{\mathrm{i}\gamma^2 t}{2I}} \tag{5.2.28}$$

在传播子表达式中参数 $\gamma = I\omega$。再次应用对称性定理 (二)，代入两对称点角度差

$$\beta = \pi \tag{5.2.29}$$

我们得到同伦类传播子关系

$$K_{-n-1} = K_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\gamma(2n+1)\pi} \tag{5.2.30}$$

重复方程 (5.2.8)~ 方程 (5.2.11) 的计算, 可确定相位参数值为

$$\delta = 2\pi\gamma \tag{5.2.31}$$

退回到实验室坐标系, 基空间相对于转动环运动的自由转子传播子则变为

$$K = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2n\gamma\pi} K_n = \left[\frac{I}{2\pi \mathrm{i}t}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}I\phi^2}{2t}} \Theta_3 \left[\pi\left(\frac{I\pi\phi}{t} - \gamma\right), \frac{2\pi I}{t}\right] \tag{5.2.32}$$

同样重复方程 (5.2.23)∼ 方程 (5.2.25) 的运算, 不难得到能量本征值和波函数

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+\gamma)\phi}, \quad E_m = \frac{1}{2I}(m+\gamma)^2 \tag{5.2.33}$$

注意 $\gamma = I\omega$ 可以是任意值, 当其是分数时, 我们有分数角动量，波函数有一共同的相位移动。根据第 3 章中的论述，分数角动量是由于空间扭曲，这里旋转圆环造成了扭曲。我们这里考虑旋转圆环, 若环不动而粒子以一固定角速度旋转, 在随粒子旋转的坐标系中同样会有空间扭曲和拓扑相位。

关于分数角动量本征波函数的说明：需要指出的是，系统中所有本征波函数都有共同的拓扑相因子，用本征态叠加成的任意态也有相同的拓扑相因子，而波函数的几率密度和正交规一化条件则和拓扑相因子无关。但相因子可引起相位干涉，如著名的 AB 效应就是拓扑相位干涉的结果。

5.2.4 AB 规范场中的平面转子

1. 定态磁通情况 —— 分数角动量

假定有一位于圆环中心并和环平面垂直的 AB 磁通

$$\Phi = \alpha \Phi_0$$

其中, 无量纲参数 $0 < \alpha < 1$, 而 Φ_0 是磁通量子单位。一电荷为 e 约束在环上运动粒子的拉氏量是

$$L = \frac{I}{2}\dot{\phi}^2 + \alpha\dot{\phi} \tag{5.2.34}$$

定态磁通的规范场不可能对荷电粒子产生相对圆环轴的力矩, 从而改变其角速度, 角动量是守恒量。用变量变换

$$\theta = \phi + \frac{\alpha}{I}t \tag{5.2.35}$$

可化为如下的自由转子拉氏量：

$$L = \frac{I}{2}\dot{\theta}^2 - \frac{\alpha^2}{2I} \tag{5.2.36}$$

因而第 n 个同伦类传播子在覆盖空间 M^* 可用路径积分的自由粒子公式计算, 结果是

$$\tilde{K}(\tilde{\theta}_n, t; 0) = \left[\frac{I}{2\pi \mathrm{i}t}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}I}{2t}\left(\tilde{\theta}_n^2 - \frac{\mathrm{i}\alpha^2 t}{2I}\right)} \tag{5.2.37}$$

用覆盖空间和基空间角变量的关系，并返回原变量 ϕ, 我们得到

$$\begin{aligned}K_n(\phi,t;0)&=\left[\frac{I}{2\pi\mathrm{i}T}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}I}{2t}\left(\phi+\frac{\alpha}{I}t+2n\pi\right)^2-\frac{\mathrm{i}\alpha^2t}{2I}}\\&=K_n^{(0)}(\phi,t;0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(\phi+2n\pi)}\end{aligned}\tag{5.2.38}$$

其中, $K_n^{(0)}(\phi,t;0)$ 是方程 (5.2.18) 给出的自由转子传播子。因为磁通规范场存在，方程 (5.2.3) 的对称关系破缺，用 $\phi=\pi$, 不难验证

$$K_{-n-1}=K_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\alpha(2n+1)\pi}\tag{5.2.39}$$

再重复方程 (5.2.8)~ 方程 (5.2.11) 的计算, 相位参数可确定为

$$\delta=2\pi\alpha\tag{5.2.40}$$

基空间传播子有十分简单的形式

$$K=K^{(0)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\phi}\tag{5.2.41}$$

$K^{(0)}$ 是如方程 (5.2.21) 所示的自由转子传播子。用同样的方法可得到精确的能量本征值和本征波函数

$$\psi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+\alpha)\phi},\quad E_m=\frac{m^2}{2I}\tag{5.2.42}$$

我们再次推导出分数角动量和有拓扑相因子的波函数, 这里空间扭曲是由 AB 磁通的规范场产生的。分数角动量只是对正则角动量而言, 因为正则角动量才是空间转动算符，由于没力矩作用，力学角动量谱是整数，不受定态磁通规范场的影响。路径积分量子化的优越性是只涉及完全确定的经典动力学，波函数是由严格数学推导得出的，不存在 Schrödinger 方程求解中波函数边条件选取的人为因素和争议。当然，分数角动量本征波函数也可作为正交基矢, 因为所有本征态 (因而系统中的所有态矢) 有相同的拓扑相因子，正交规一性不受任何影响。

2. 随时间变化的磁通 —— 整数角动量

现在考虑磁通建立的动力学过程，由于磁通的变化产生感生电场，有力矩作用在带电粒子上。随时间变化的磁通表示为

$$\varPhi=\alpha f(t)\varPhi_0\tag{5.2.43}$$

$f(t)$ 只是时间函数，拉氏量当然是

$$L=\frac{I}{2}\dot{\phi}^2+\alpha\dot{\phi}f(t)\tag{5.2.44}$$

从这一拉氏量得到下面的运动方程：

$$\ddot{\phi} + \frac{\alpha}{I}\dot{f} = 0 \tag{5.2.45}$$

磁通变化感生的电场产生了带电粒子的角加速度。作变量变换

$$\dot{\beta} = \dot{\phi} + \frac{\alpha}{I} f(t) \tag{5.2.46}$$

拉氏量可化为标准的自由转子形式

$$L = \frac{I}{2}[\dot{\beta}]^2 - \frac{\alpha^2}{2I} f^2(t) \tag{5.2.47}$$

因而, 同伦类传播子可用自由转子公式计算

$$K_n(\beta, t; 0) = \left[\frac{I}{2\pi \mathrm{i} T}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}I}{2t}(\beta+2n\pi)^2 - \frac{\mathrm{i}\alpha^2 G(t)}{2I}} \tag{5.2.48}$$

$$G(t) = \int_0^t f^2(t')\mathrm{d}t'$$

用 $\beta = \pi$ 容易验证，对称关系方程 (5.2.7) 成立, 因而

$$\delta = 0$$

假定磁通在 t 时刻瞬时建立, 即

$$f(t) = \Theta(t) \tag{5.2.49}$$

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1, & t \geqslant 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases} \tag{5.2.50}$$

是通常的跳变函数。当磁通达到稳定值 $\Phi = \alpha\Phi_0$ 后, 即 $t > 0$, 传播子是

$$K(\phi, t; 0) = \left[\frac{I}{2\mathrm{i}\pi t}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}I}{2t}\left(\phi + \frac{\alpha t}{I}\right)^2 - \frac{\mathrm{i}\alpha^2 t}{2I}} \tag{5.2.51}$$

$$\times \Theta_3\left[\frac{\pi I}{T}\left(\phi + \frac{\alpha t}{I}\right), \frac{2I\pi}{t}\right] \tag{5.2.52}$$

用同样的方法可得到文献中熟悉的能量本征值和波函数

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}, \quad E_m = \frac{1}{2I}(m-\alpha)^2 \tag{5.2.53}$$

正则角动量是整数, 而力学角动量被平移一磁通数, 这是因为磁通建立时感生电场的力矩作用。在这种情况下，磁通规范场产生的扭曲正好被粒子的定轴旋转抵消，同伦类传播子的动力学对称性无破缺。

5.3 配分函数的路径积分表示

用路径积分同样可计算量子力学热平均问题, 假定系统 Hamilton 算符有标准形式

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}}{2}+V(\hat{q}) \tag{5.3.1}$$

(单位质量)。在量子力学配分函数中插入坐标基矢完备性关系，很容易得到其路径积分表示

$$Z=\mathrm{Tre}^{-\beta\hat{H}}=\sum_{n}\langle n|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|n\rangle=\int\sum\langle n|q_{\mathrm{f}}\rangle\langle q_{\mathrm{f}}|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|q_{\mathrm{i}}\rangle\langle q_{\mathrm{i}}|n\rangle\mathrm{d}q_{\mathrm{f}}\mathrm{d}q_{\mathrm{i}} \tag{5.3.2}$$

用本征态的完备性 $|n\rangle\langle n|=1$，及传播子的定义

$$K(q_{\mathrm{f}},\beta;q_{\mathrm{i}},0)=\langle q_{\mathrm{f}}|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|q_{\mathrm{i}}\rangle$$

立即有

$$Z=\int\mathcal{D}\{q\}\mathrm{e}^{-\mathcal{S}},\quad \mathcal{S}=\int_{0}^{\beta}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\tau}\right)^{2}-V(q)\right]\mathrm{d}\tau \tag{5.3.3}$$

5.4 量子隧穿的瞬子理论

势垒隧穿是点粒子系统量子化的一个必然推论，但没有经典粒子轨道对应，因为经典粒子不可能穿越势能大于其总能量的区域。从量子力学波函数的观点，有限高和宽度的势垒内波函数不为零，而变为衰减波，即把实时间换为虚时间。从路径积分的观点，粒子的经典路径对传播子贡献最大，有经典和量子之间的对应。似乎这种对应在势垒隧穿中不成立，因为势垒中没有经典轨道, 存在明显的矛盾。势垒隧穿的瞬子理论克服了这种表面的矛盾，把“粒子轨道”的概念扩展到势垒中。因为在势能大于总能量的区域，粒子动能为负，只要换成虚时间，则粒子的轨道概念仍然成立，这和势垒中的虚时波函数 (衰减波) 一致。我们称这种虚时赝粒子为瞬子 (instanton)，它是 Euclid 空间场论的术语。

5.4.1 简并基态间的往复共振隧穿——瞬子，拓扑荷

量子隧穿可分为两类, 一种是在简并基态间穿越中间势垒的往复共振隧穿, 其结果是使简并解除, 产生能级劈裂, 对应的虚时赝粒子解有非零的拓扑荷称为瞬子。另一种情况是亚稳态的量子隧穿衰变，对应的虚时赝粒子解的拓扑荷为零，称为 bounce (反弹子)。

1. 瞬子，拓扑荷

两个典型一维势模型：

(1) 双势阱势

$$V_1(\phi)=\frac{\eta^2}{2}\left(\phi^2-\frac{m^2}{\eta^2}\right)^2 \tag{5.4.1}$$

η 和 m 是调节参数。图 5.4.1 是双势阱示意图，势能有两个对称最小值分别位于 $\phi_\pm=\pm\dfrac{m}{\eta}$，势垒高度是 $\dfrac{m^4}{2\eta^2}$。

(2) 周期势，sine-Gordon 势

$$V_2(\phi)=\frac{1}{g^2}[1+\cos(g\phi)] \tag{5.4.2}$$

图 5.4.2 是其示意图。这是场论中著名的 sine-Gordon 势，在 $1+1$ 维非线性场中得到了解析孤子解 —— 拓扑孤子，即所谓的 “kink” 解。

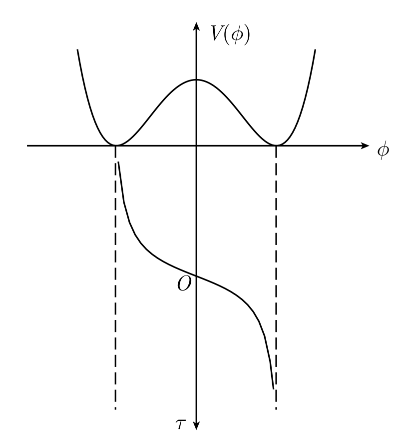


图 5.4.1　双势阱及瞬子轨道

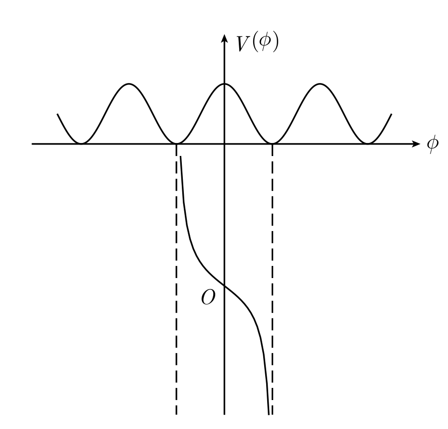


图 5.4.2　sine-Gordon 势及瞬子轨道

单位质量的粒子拉氏量是

$$L=\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t}\right)^2-V(\phi) \tag{5.4.3}$$

我们考虑势阱 $\phi_\pm$ 之间，穿越势垒的赝粒子 Feynman 传播子，引入虚时 $\tau=\mathrm{i}t$，初始时间 $\tau_\mathrm{i}=-\beta$，初位置 $\phi_-=-\dfrac{m}{\eta}$， 在时间 $\tau_\mathrm{f}=\beta$，穿越势垒到达 $\phi_\mathrm{f}=\dfrac{m}{\eta}$ 的虚时传播子根据定义是

$$K(\phi_+,\beta;\phi_-,-\beta)=\int\mathcal{D}\{\phi\}\mathrm{e}^{-\mathcal{S}} \tag{5.4.4}$$

其中

$$\mathcal{S}=\int_{-\beta}^{\beta}\mathcal{L}\mathrm{d}\tau$$

和

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(\phi) \tag{5.4.5}$$

分别是虚时作用量和拉氏量。注意到势能改变了符号，所以瞬子也可以看成是在翻转势中运动的粒子，势垒则变成了势阱。由拉氏量可得到瞬子的运动方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}\tau^2} - \frac{\partial V(\phi)}{\partial \phi} = 0 \tag{5.4.6}$$

积分一次变为

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 - V(\phi) = -E \tag{5.4.7}$$

积分常数 E 显然是瞬子能量。我们先考虑零能 ($E=0$) 隧穿，方程可直接积分，得到解析解。双势阱和 sine-Gordon 势的瞬子解分别是

$$\phi_c(\tau) = \frac{m}{\eta}\tanh(\tau+\tau_0) \tag{5.4.8}$$

和

$$\phi_c(\tau) = \frac{2}{g}\arcsin(\tanh(\tau+\tau_0)) \tag{5.4.9}$$

积分常数 τ_0 由初始条件确定。图 5.4.1 画出了双势阱势瞬子轨道，当选 $\tau_0=0$ 时，瞬子在初时刻 $\tau_{\mathrm{i}}=-\infty$ 从左势阱 ϕ_- 出发，在 $\tau=0$ 时刻到达势垒中心，当 $\tau_{\mathrm{f}}=\infty$ 时到达右势阱。sine-Gordon 势的瞬子轨道见图 5.4.2。

根据拓扑荷的定义，在我们的一维 Euclid 空间，拓扑荷 (以双势阱为例) 是

$$Q = \lim_{\beta\to\infty}\frac{\eta}{2m}[\phi_c(\beta)-\phi_c(-\beta)] = 1 \tag{5.4.10}$$

有非零拓扑荷。瞬子对应实时间场论中的拓扑孤子。

2. 定态相位微扰

用定态相位微扰可得到单圈近似的量子隧穿传播子，为此考虑相对瞬子轨道 ϕ_c 的微小扰动 χ

$$\phi(\tau) = \phi_c(\tau) + \chi(\tau) \tag{5.4.11}$$

把前面推导出的传播子定态相位微扰公式 (方程 (5.1.23)) 中的时间换成虚时则有

$$\lim_{\beta\to\infty} K(\phi_+,\beta;\phi_-,-\beta) = \mathrm{e}^{-\mathcal{S}_c} I \tag{5.4.12}$$

其中微扰积分是

$$I = \int \mathcal{D}\{\chi\}\mathrm{e}^{-\int_{-\infty}^{\infty}\chi\hat{M}\chi\mathrm{d}\tau} \tag{5.4.13}$$

二阶微扰算符是

$$\hat{M} = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + \frac{\partial^2 V(\phi_c)}{\partial \phi^2}\right]$$

注意现在的路径积分传播子 e 指数形式是 $\mathrm{e}^{-\mathcal{S}}$，经典作用量 ($\delta\mathcal{S} = 0$) 是极小值，因而对积分贡献最大，数学上是严谨的，称为积分的最陡下降法 (steepest descent method)。用瞬子解方程 (5.4.8) 和方程 (5.4.9) 可求得双势阱和 sine-Gordon 势瞬子作用量分别是

$$\mathcal{S}_c = \frac{4m^3}{3\eta^2} \tag{5.4.14}$$

$$\mathcal{S}_c = \frac{8}{g^2} \tag{5.4.15}$$

二次微扰变分算符 $\hat{M}$ 有实本征函数记为 $\psi_n(\tau)$

$$\hat{M}\psi_n = \epsilon_n \psi_n \tag{5.4.16}$$

把相对瞬子的偏离变量 η 按本征函数展开

$$\chi(\tau) = \sum_{n=1}^{N} c_n \psi_n(\tau) \tag{5.4.17}$$

代入传播子公式，方程 (5.4.13) 的微扰积分

$$I = \left|\frac{\partial \chi}{\partial c_n}\right| \int \mathcal{D}\{c_n\} \mathrm{e}^{-\sum \epsilon_n c_n^2} \tag{5.4.18}$$

积分前的因子是变量变换式式 (5.4.11) 的 Jacobi 行列式。c_n 变量积分是 Gauss 积分可积出，结果是

$$I = \left|\frac{\partial \chi}{\partial c_n}\right| \frac{1}{\sqrt{\det \dfrac{\hat{M}}{\pi}}} \tag{5.4.19}$$

3. 零模和零模发散问题

对于基态瞬子解 $\phi_c(\tau)$, 二次微扰变分算符 $\hat{M}$ 若有零模 $E_0 = 0$ 存在

$$\hat{M}\psi_0 = 0 \tag{5.4.20}$$

二次微扰积分发散。事实上很容易证明零模就是瞬子解的时间导数

$$\psi_0 = \frac{\mathrm{d}\phi_c(\tau)}{\mathrm{d}\tau} \tag{5.4.21}$$

幸运的是，这种零模发散可用场论中的 Faddeev-Popov 技术消除。

作业 5.3 证明 $\psi_0 = \dfrac{\mathrm{d}\phi_c(\tau)}{\mathrm{d}\tau}$。

4. 简并基态的量子隧穿关联, 宏观量子态相干和 Schrödinger 猫态

假定双势阱势的 Hamilton 算符

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(\phi)$$

有局域简并基态 $|\pm\rangle$ 分别局限在 $\pm$ 标记的两个势阱内, 它们当然不是 $\hat{H}$ 的本征态, 可以理解为势能 $V(\phi)$ 分别在两极小值位置 $\phi_\pm$ 小振动展开的基态。在量子隧穿劈裂远小于小振动能级差条件下, 如高势垒情况, 可以用双模近似, 即只考虑 $\phi_\pm$ 张成的子空间。量子隧穿引起两简并态关联，Hamilton 算符 $\hat{H}$ 的基态

$$\hat{H}|0\rangle = E_0|0\rangle$$

和第一激发态

$$\hat{H}|1\rangle = E_1|1\rangle$$

则是

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle), \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) \tag{5.4.22}$$

基态和第一激发态能量本征值分别是

$$E_{0,1} = \bar{E} \mp \frac{\Delta E}{2} \tag{5.4.23}$$

其中

$$\Delta E = -(\langle +|\hat{H}|-\rangle + \langle -|\hat{H}|+\rangle) \tag{5.4.24}$$

表示隧穿劈裂, 而

$$\bar{E} = \langle +|\hat{H}|+\rangle = \langle -|\hat{H}|-\rangle \tag{5.4.25}$$

则是 Hamilton 算符在局域态上的平均值。粒子在两势阱内以频率 $\omega = \dfrac{\Delta E}{\hbar}$ 往复隧穿振荡，隧穿率是

$$\Gamma = \frac{\omega}{\pi} \tag{5.4.26}$$

作业 5.4　用双模近似求解含时 Schrödinger 方程，证明隧穿振荡频率 $\omega = \dfrac{\Delta E}{\hbar}$。

对于方程 (5.4.2) 的周期势, 隧穿劈裂扩展成能带, 用一维格点紧束缚近似能带公式不难得到 sine-Gordon 势的基态能带是

$$E = \bar{E} - 2\Delta E \cos\frac{2\pi k}{g} \tag{5.4.27}$$

$\bar{E}$ 是 Hamilton 算符在单个势阱局域态上的平均值, ΔE 是相邻势阱间的隧穿劈裂。k 表示 Bloch 波矢, 这里的 “晶格” 常数显然是 $\dfrac{2\pi}{g}$。

双势阱量子隧穿有广泛的应用, 场论中曾被用来作为描述简并真空及其关联的 "Toy" 模型，探讨轻重子数不守衡等相关问题，近年来被用以研究宏观量子效应。如果把 $|\pm\rangle$ 看作两个宏观量子态, 经典意义上，两个态是不相干的，如果量子隧穿有显著效应的话，即可实现宏观量子态的相干叠加，即 Schrödinger 猫态。

5.4.2 双势阱基态共振隧穿几率的计算

1. 单个瞬子隧穿的传播子

出发点是简并基态间量子隧穿传播子方程 (5.4.4)

$$K(\phi_+,\beta;\phi_-,-\beta)=\langle\phi_+|\mathrm{e}^{-2\beta\hat{H}}|\phi_-\rangle=\int\mathcal{D}\{\phi\}\mathrm{e}^{-\mathcal{S}} \tag{5.4.28}$$

另一方面，用双模近似不难得到

$$\langle\phi_+|\mathrm{e}^{-2\beta\hat{H}}|\phi_-\rangle=\varPsi^*(\phi_-)\varPsi(\phi_+)\mathrm{e}^{-2\beta E_0}\sinh(\beta\Delta E_0) \tag{5.4.29}$$

$\varPsi^*(\phi_-)$ 和 $\varPsi(\phi_+)$ 是两个待定常数, 分别表示两局域基态波函数在 $\phi_\pm$ 的值。

我们用路径积分计算出传播子, 然后和等式右边比较，从而确定基态能级劈裂 ΔE_0。

用定态相位微扰得到

$$K=\int\mathcal{D}\{\phi\}\mathrm{e}^{-\mathcal{S}}\approx\mathrm{e}^{\mathcal{S}_c}I \tag{5.4.30}$$

再采用文献中计算微扰传播子方程 (5.4.13) 的方法, 引入变换

$$\xi(\tau)=\chi(\tau)-\int_{-\beta}^{\tau}\frac{\dot{\psi}_0(\tau')}{\psi_0(\tau')}\mathrm{d}\tau' \tag{5.4.31}$$

注意到 ψ_0 满足的方程, 此变换正好消掉等效势能部分, 使其变为 ξ 变量的自由粒子传播子。注意到 χ 满足固定端点条件, 插入 Lagrange 乘子，微扰积分可算出

$$I=\lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{\psi_0(\beta)\psi_0(-\beta)\displaystyle\int_{-\beta}^{\beta}\frac{\mathrm{d}\tau}{\psi_0^2(\tau)}}} \tag{5.4.32}$$

2. 稀薄瞬子气近似

路径积分要求对所有可能的路径求和, 传播子计算应包括多体瞬子贡献, 忽略瞬子之间的相互作用 (称为稀薄瞬子气近似), 我们有

$$K=\sum_{n=0}^{\infty}K_{(2n+1)} \tag{5.4.33}$$

其中 $K_{(2n+1)}$ 表示一个瞬子和 n 个瞬子对的传播子 (图 5.4.3)

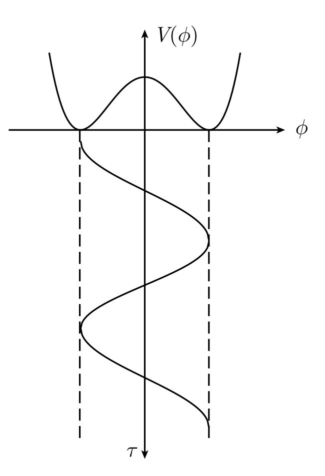


图 5.4.3 一个瞬子和一个瞬子对

多个瞬子传播子的计算要用到传播子的群特性, 相邻传播子之间有端点积分。

有兴趣的读者可在本章所列文献中找到详细的推导, 我们这里分别给出双势阱和 sine-Gordon 势的基态能级劈裂公式

$$\Delta E_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{2^3 m}{g}\mathrm{e}^{-\frac{4}{3g^2}}, \quad g^2 = \frac{\eta^2}{m^3} \tag{5.4.34}$$

和

$$\Delta E_0 = \frac{4}{\sqrt{\pi}g}\mathrm{e}^{-\frac{8}{g^2}} \tag{5.4.35}$$

5.4.3　亚稳基态的量子隧穿衰变——bounce (非拓扑解)

亚稳基态的量子隧穿衰变是早已熟知的量子现象, 如核衰变、量子成核 (quantum nucleation) 等。如图 5.4.4 形式的势，由于存在量子隧穿，局域基态是不稳定的，Hamilton 算符不是厄米的，局域基态能量变成复数

$$E_0 = \Re E_0 + \mathrm{i}\Im E_0 \tag{5.4.36}$$

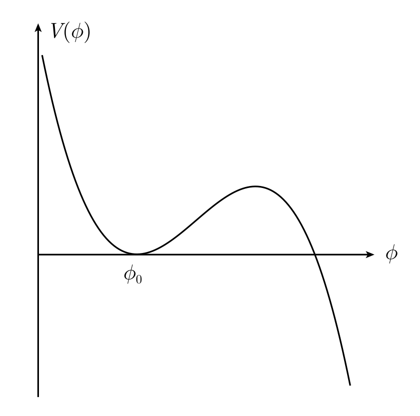
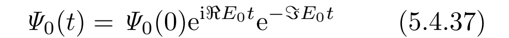


图 5.4.4　亚稳基态

基态变为表变波，



$$\Psi_0(t) = \Psi_0(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Re E_0 t}\mathrm{e}^{-\Im E_0 t} \tag{5.4.37}$$

基态的绝对值是

$$|\Psi_0(t)| = |\Psi_0(0)|\mathrm{e}^{-\Im E_0 t} \tag{5.4.38}$$

$$\frac{\mathrm{d}|\Psi_0(t)|}{\mathrm{d}t} = -\Im E(0)|\Psi_0(t)| \tag{5.4.39}$$

亚稳基态的衰变率 (回到正常单位)

$$\Gamma = \frac{\Im E_0}{\hbar} \tag{5.4.40}$$

亚稳态的寿命

$$T = \frac{1}{\Gamma} \tag{5.4.41}$$

1. Bounce

反转双势阱势能可表示为

$$V = m^2\phi^2 - \frac{1}{2}g^2\phi^4 \tag{5.4.42}$$

零势能点 $\phi = 0$ 是亚稳基态, 另外两个零势能点

$$\phi_{\pm} = \pm\frac{\sqrt{2}m}{g}$$

称为反转点 (图 5.4.5)。描述量子隧穿的赝粒子局限于 $\phi=0$ 和反转点之间的势垒中运动, 经典解满足方程

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}\tau}\right)^2-V(\phi_c)=0 \tag{5.4.43}$$

边条件是

$$\phi_c|_{\tau\to\pm\infty}=0 \tag{5.4.44}$$

$$\frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}\tau}|_{\tau=0}=0,\quad \frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}\tau}|_{\tau\to\pm\infty}=0 \tag{5.4.45}$$

能量为零的经典解为

$$\phi_c=\frac{\sqrt{2}m}{g}\,\mathrm{sech}(\sqrt{2}m\tau) \tag{5.4.46}$$

其轨道如图 5.4.5 所示, 当时间趋于负无穷时, 粒子从平衡点 $\phi=0$ 以零速度开始运动, 在时间 $\tau=0$ 到达反转点 ϕ_+(或者 ϕ_-), 然后反转, 当时间趋于正无穷时返回起始点 $\phi=0$, 好像在反转点被弹回, 故称为 “bounce” (反弹子)。其拓扑荷为零

$$Q=0$$

对应场论中的非拓扑孤子解，有时也称为非拓扑瞬子。

-bb-error = =

图 5.4.5 反转双势阱和 “bounce” 轨道

2. 反转双势阱亚稳态隧穿率的计算, 负模

bounce 的量子隧穿传播子记为

$$K(\phi_\mathrm{f},\beta;\phi_\mathrm{i}-\beta)=\langle\phi_\mathrm{f}|\mathrm{e}^{-2\beta\hat{H}}|\phi_\mathrm{i}\rangle \tag{5.4.47}$$

插入能量本征态完备性关系, 在极限情况下,

$$\beta\to\infty,\quad \phi_\mathrm{f},\phi_\mathrm{i}\to 0$$

只有基态隧穿起主导作用, 因而

$$\lim_{\beta\to\infty}K(\phi_\mathrm{f},\beta;\phi_\mathrm{i},-\beta)=\Psi_0(0)\Psi_0^*(0)\mathrm{e}^{-2E_0\beta} \tag{5.4.48}$$

基态能量 E 和待定参数 $\Psi_0(0)$ 可由虚时路径积分计算

$$\Psi_0(0)\Psi_0^*(0)\mathrm{e}^{-2E_0\beta}=\mathrm{e}^{-\mathcal{S}_c}I \tag{5.4.49}$$

单个 bounce 作用量可沿经典轨道直接积分, 结果是

$$\mathcal{S}_c = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}\tau} \right)^2 + V(\phi_c) \right] \mathrm{d}\tau = \frac{4\sqrt{2}m^2}{3g^2} \tag{5.4.50}$$

二阶微扰本征方程

$$\hat{M}\psi_n = \epsilon_n \psi_n$$

$$\hat{M} = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} + [-6m^2 \mathrm{sech}^2(\sqrt{2}m\tau) + m^2] \tag{5.4.51}$$

除零模外还有一负模, 说明 bounce 是不稳定解, 从定态相位微扰公式 (5.4.19) 可看出传播子变为虚的，使基态能量有了虚部，bounce 隧穿引起局域基态衰变。二阶微扰可用引入变量变换的方法由零模本征函数

$$\psi_0 = \frac{\mathrm{d}\phi_c(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = -\frac{2m^2}{g}\frac{\sinh(\sqrt{2}m\tau)}{\cosh^2(\sqrt{2}m\tau)} \tag{5.4.52}$$

直接积分得到, 把式 (5.4.52) 代入方程 (5.4.32) 取极限

$$I|_{\beta\to\infty} = -\mathrm{i}\left[\frac{\sqrt{2}m}{\pi}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.4.53}$$

二阶微扰是纯虚数，这完全由 bounce 的拓扑荷是零而产生，因为方程 (5.4.32) 根号下有一因子即

$$\sqrt{\psi_0(\beta)\psi_0(-\beta)}$$

$$\psi_0 = \frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}\tau}$$

对于双势阱的拓扑瞬子

$$\psi_0(\beta)$$

和

$$\psi_0(-\beta)$$

符号相同, 而 bounce 则符号相反, 因反弹回来速度变号该因子变为虚数。

用类似的方法得到两个 bounde 传播子 K_2, 根据传播子 “相乘” 的特性要对两 bounce 传播子中间坐标积分。对无穷多 bounce 传播子求和, 则有

$$\begin{aligned} K(\phi_\mathrm{f},\beta;\phi_\mathrm{i}'-\beta) &= \sum_{n=0}^{\infty} K_n(\phi_\mathrm{f},\beta;\phi_\mathrm{i}'-\beta) \\ &= \left[\frac{m}{\pi}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\sqrt{2}m\beta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\beta\frac{4m}{g}[\frac{m^3}{\pi}]^{\frac{1}{2}}}\mathrm{e}^{-\frac{4\sqrt{2}m^3}{3g^2}} \end{aligned} \tag{5.4.54}$$

和方程 (5.4.49) 比较, 可得出亚稳基态的能量虚部是

$$\Im E_0 = \frac{4m}{g}\left[\frac{m^3}{2\pi}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{4m^3}{3g^2}} \tag{5.4.55}$$

5.5 周期瞬子和激发态量子隧穿

瞬子隧穿在弱电统一场论中有重要应用, 例如简并真空间瞬子隧穿引起的轻重子数守恒破坏, 近年来的磁性宏观量子效应也建立在瞬子隧穿基础上。因为基态隧穿率太小，很难有观测效应，在上述两种情况下，都需要考虑激发态量子隧穿。基态瞬子虚时周期趋于无穷，是零温度隧穿理论，无法解释磁性宏观量子效应的磁弛豫温度曲线, 有必要发展有限能量和温度的量子隧穿理论。当非零能量时，瞬子解满足周期边条件称为周期瞬子。

5.5.1 周期瞬子及其稳定性

对于势能是 $V(\phi)$ 的虚时拉氏量

$$L=\frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\tau}\right]^2+V(\phi) \tag{5.5.1}$$

积分一次后的运动方程变为

$$\frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\tau}\right]^2-V(\phi)=-E \tag{5.5.2}$$

积分参数 E 是能量。

双势阱势和 sine-Gordon 势的周期解分别是:

(1) 双势阱势

$$\phi_c=\frac{kb(k)}{\eta}\,\mathrm{sn}(b(k)\tau) \tag{5.5.3}$$

该解满足周期条件

$$\phi_c(-2\beta)=\phi_c(2\beta)=0 \tag{5.5.4}$$

Jacobi 椭圆函数 $\mathrm{sn}(b(k)\tau)$ 的周期是 $4n\mathcal{K}(k)$, 其中 n 是整数, 而 $\mathcal{K}$ 表示第一类完全椭圆积分, 显然当 $b(k)\beta=\mathcal{K}$ 时, 周期瞬子满足要求的边条件, 参数的定义是

$$k^2=\frac{1-u}{1+u},\quad u=\frac{\eta}{m^2}\sqrt{2E}$$

$$b(k)=m\left[\frac{2}{1+k^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.5.5}$$

图 5.5.1 给出了周期瞬子的轨道。

只有从 $-\beta$ 到 β 的半个周期解，对能量为 E 的量子隧穿有贡献, 半周期拓扑荷为

$$Q=\frac{\eta}{m}[\phi_c(\beta)-\phi_c(-\beta)]=k\left[\frac{2}{1+k^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.5.6}$$

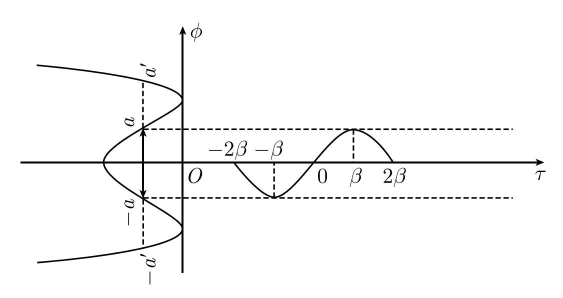


图 5.5.1 周期瞬子轨道

(2) sine-Gordon 势

$$\phi_c = \frac{2}{g}\arcsin[k\,\mathrm{sn}(\tau)] \tag{5.5.7}$$

$k=\sqrt{1-g^2\dfrac{E}{2}}$, 零能时 $E=0, k\to 1$, 周期趋于无穷, 周期瞬子解退回到基态瞬子解。二阶微扰算符是

$$\hat{M} = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} - [1-2k^2[\mathrm{sn}(\tau)]^2] \tag{5.5.8}$$

其分离的本征波函数是

$$\psi_1 = \mathrm{cn}(\tau), \quad \psi_2 = \mathrm{dn}(\tau), \quad \psi_3 = \mathrm{sn}(\tau)$$

对应的本征值分别是

$$\epsilon_1 = 0, \quad \epsilon_2 = k^2 - 1, \quad \epsilon_3 = k^2$$

ϵ_2 是负的, 称为负模，周期瞬子不是稳定解。双势阱周期瞬子同样有负模存在，也非稳定解。

5.5.2 负模困难及消除

根据前面的论述, 二阶微扰算符的负模使传播子变成复数, 从而隧穿劈裂产生虚部, 这当然是非物理的结果, 因为 Hamilton 量是厄米的, 有实能谱。这一表面的困难可由瞬子满足的边条件消除，事实上，相对瞬子的偏差要求固定端点，即

$$\chi(\beta) = \chi(-\beta) = 0, \quad \beta \to \mathcal{K} \tag{5.5.9}$$

根据微扰算符本征模的展开式

$$\chi = \sum_n c_n \psi_n$$

齐次的端点边条件对展开系数有下列约束条件：

$$c_1\psi_1(\pm\mathcal{K}) + c_2\psi_2(\pm\mathcal{K}) + c_3\psi_3(\pm\mathcal{K}) = 0 \tag{5.5.10}$$

根据 Jacobi 椭圆函数的值

$$\mathrm{cn}(\mathcal{K})=0,\quad \mathrm{dn}(\mathcal{K})=k',\quad \mathrm{sn}(\mathcal{K})=1$$

其中 $k'=\sqrt{1-k^2}$。

上述约束条件变为

$$c_2k'+c_3=0,\quad c_2k'-c_3=0 \tag{5.5.11}$$

方程有唯一解

$$c_2=c_3=0 \tag{5.5.12}$$

齐次边条件的要求把负模自动从微扰展开中除去。

5.5.3 激发态共振隧穿率的计算

我们考虑能量为 E 的激发态量子隧穿, 假定两势阱中相应的局域简并能态，分别是 $|E(\pm)\rangle$, 量子隧穿使两态关联, 简并解除, 能级劈裂。为此，我们从两简并态间的瞬子隧穿几率幅 $A_{+,-}$ 着手, 在能级劈裂远小于相邻两能级差的情况下，仍可用双模近似，因而有

$$A_{+,-}=\langle E(+)|\mathrm{e}^{-2\beta\hat{H}}|E(-)\rangle=\mathrm{e}^{-2\beta\bar{E}}\sinh(\beta\Delta E) \tag{5.5.13}$$

其中

$$\bar{E}=\langle E(+)|\hat{H}|E(+)\rangle=\langle E(-)|\hat{H}|E(-)\rangle$$

而 ΔE 表示能级劈裂。插入坐标算符本征态完备性关系，隧穿几率幅可用瞬子传播子表示为

$$A_{+,-}=\lim_{\tau_{\mathrm{i},f}\to\mp\mathcal{K}}\int\psi^*_{E(+)}(\phi_{\mathrm{f}})\psi_{E(-)}(\phi_{\mathrm{i}})K(\phi_{\mathrm{f}},\tau_{\mathrm{f}};\phi_{\mathrm{i}},\tau_{\mathrm{i}})\mathrm{d}\phi_{\mathrm{f}}\mathrm{d}\phi_{\mathrm{i}} \tag{5.5.14}$$

其中, 势垒内的波函数选取了通常的 WKB 形式

$$\psi_{E(-)}(\phi_{\mathrm{i}})=\frac{C\mathrm{e}^{-\int_{-a}^{\phi_{\mathrm{i}}}N(\phi)\mathrm{d}\phi}}{\sqrt{N(\phi_{\mathrm{i}})}}$$

$$\psi_{E(+)}(\phi_{\mathrm{f}})=\frac{C\mathrm{e}^{-\int_{\phi_{\mathrm{f}}}^{a}N(\phi)\mathrm{d}\phi}}{\sqrt{N(\phi_{\mathrm{f}})}} \tag{5.5.15}$$

而

$$N(\phi)=\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\tau}$$

归一化常数取为

$$C=\left[\frac{1}{2}\int_a^{a'}\frac{\mathrm{d}\phi}{\sqrt{2(E-V)}}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.5.16}$$

积分限 $\pm a$ 和 a' 是如图 5.5.1 所示的瞬子轨道反转点。

双势阱和 sine-Gordon 势的归一化常数和 $N(\phi)$ 分别是:

(1) 双势阱

$$C=\left[\frac{m\sqrt{1+u}}{2\mathcal{K}(k')}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.5.17}$$

$$N(\phi_c)=\frac{kb^2(k)}{\eta}\,\mathrm{cn}(b(k)\tau)\,\mathrm{dn}(b(k)\tau) \tag{5.5.18}$$

(2)sine-Gordon 势

$$C=\left[\frac{1}{4\mathcal{K}(k')}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.5.19}$$

$$N(\phi_c)=\frac{2}{g}k\,\mathrm{cn}(\tau) \tag{5.5.20}$$

当

$$\tau_{\mathrm{i,f}}\to\mp\mathcal{K}$$

时，瞬子轨道端点趋近于反转点

$$\phi_{\mathrm{i,f}}\to\mp a$$

方程 (5.5.14) 中的传播子仍按定态相位微扰算到单圈近似。周期瞬子作用量和端点波函数都是端点位置的函数，在反转点邻域展开

$$S_c(\phi_{\mathrm{f}},\phi_{\mathrm{i}};\tau_{\mathrm{f}}-\tau_{\mathrm{i}})=S_c(\phi_{\mathrm{f}}=a,\phi_{\mathrm{i}}=-a;2\beta)+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 S}{\partial\phi_{\mathrm{f}}^2}|_{\phi_{\mathrm{f}}=a}(\phi_{\mathrm{f}}-a)^2 \tag{5.5.21}$$

波函数的衰减因子也在反转点邻域展开

$$\int_{\phi_{\mathrm{f}}}^{a}N(\phi)\mathrm{d}\phi\equiv\varOmega(\phi_{\mathrm{f}})\approx\frac{1}{2}\frac{\partial^2\varOmega(\phi_{\mathrm{f}})}{\partial\phi_{\mathrm{f}}^2}(\phi_{\mathrm{f}}-a)^2 \tag{5.5.22}$$

不难证明

$$\frac{\partial^2 S_c}{\partial\phi_{\mathrm{f}}^2}=\frac{1}{N(\tau_{\mathrm{f}})}\left[\dot{N}(\tau_{\mathrm{f}})+\frac{1}{N(\tau_{\mathrm{f}})}\int_{\tau_{\mathrm{i}}}^{\tau_{\mathrm{f}}}\frac{\mathrm{d}\tau}{N^2}\right] \tag{5.5.23}$$

和

$$\frac{\partial^2\varOmega(\phi_{\mathrm{f}})}{\partial\phi_{\mathrm{f}}^2}=-\frac{\dot{N}(\tau_{\mathrm{f}})}{N(\tau_{\mathrm{f}})} \tag{5.5.24}$$

反转点之间的瞬子作用量可沿瞬子轨道直接积分

$$S_c=\int\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}\tau}\right)^2+V(\phi_c)\right]\mathrm{d}\tau \tag{5.5.25}$$

利用运动方程

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(\phi_c) = -E$$

把 $V(\phi_c)$ 代入 S_c 的表达式中, 得到

$$S_c = W + 2\beta E \tag{5.5.26}$$

其中

$$W = \int_{-\beta}^{\beta}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 \mathrm{d}\tau \tag{5.5.27}$$

称为 WKB 作用量, 双势阱和 sine-Gordon 势的结果分别是:

双势阱

$$W = \frac{4m^3}{3\eta^2}(1+u)^{\frac{1}{2}}[\mathcal{E}(k) - u\mathcal{K}(k)] \tag{5.5.28}$$

sine-Gordon 势

$$W = \frac{8}{g^2}[\mathcal{E}(k) - k'^2\mathcal{K}(k)] \tag{5.5.29}$$

$\mathcal{E}(k)$ 和 $\mathcal{K}(k)$ 分别是第二类和第一类完全椭圆积分。微扰积分 I 可用引入变换

$$\chi(\tau) = \xi(\tau) + N(\tau)\int_{\tau_{\mathrm{i}}}^{\tau}\frac{\dot{N}(\tau')}{N^2(\tau')}\xi(\tau')\mathrm{d}\tau' \tag{5.5.30}$$

化为一自由粒子传播子。因为 $\chi(\tau_{\mathrm{i}}) = \chi(\tau_{\mathrm{f}}) = 0$, 显然新变量 ξ 的边条件是

$$\xi(\tau_{\mathrm{i}}) = 0 \tag{5.5.31}$$

和

$$\xi(\tau_{\mathrm{f}}) + f(\tau_{\mathrm{f}}) = 0 \tag{5.5.32}$$

而

$$f(\tau_{\mathrm{f}}) = N(\tau_{\mathrm{f}})\int_{\tau_{\mathrm{i}}}^{\tau_{\mathrm{f}}}\frac{\dot{N}(\tau)}{N^2(\tau)}\xi(\tau)\mathrm{d}\tau$$

在微扰积分 I 中插入关于边条件的 Lagrange 乘子

$$\int \mathrm{d}\xi_{\mathrm{f}}\delta(\xi(\tau_{\mathrm{f}}) + f(\tau_{\mathrm{f}})) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi_{\mathrm{f}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(\xi(\tau_{\mathrm{f}})+f(\tau_{\mathrm{f}}))} = 1 \tag{5.5.33}$$

微扰积分 I 可算出为

$$I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left|\frac{\partial\chi}{\partial\xi}\right|\left[N^2(\tau_{\mathrm{f}})\int_{\tau_{\mathrm{i}}}^{\tau_{\mathrm{f}}}\frac{\mathrm{d}\tau}{N^2(\tau)}\right]^{-\frac{1}{2}} \tag{5.5.34}$$

代入 Jacobi 变换行列式

$$\left|\frac{\partial\chi}{\partial\xi}\right| = \left[\frac{N(\tau_{\mathrm{f}})}{N(\tau_{\mathrm{i}})}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.5.35}$$

微扰积分 I 结果是

$$I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[N(\tau_{\mathrm{i}}) N(\tau_{\mathrm{f}}) \int_{\tau_{\mathrm{i}}}^{\tau_{\mathrm{f}}} \frac{\mathrm{d}\tau}{N^2(\tau)} \right]^{-\frac{1}{2}} \tag{5.5.36}$$

几率幅方程 (5.5.14) 的端点积分都是 Gauss 型积分，完成端点积分后，得到的单个瞬子隧穿跃迁几率幅有十分简单的形式

$$A^{(1)}_{+,-} = 2\beta C^2 \mathrm{e}^{-W} \mathrm{e}^{-2E\beta} \tag{5.5.37}$$

一个瞬子加一个瞬子和反瞬子对的隧穿几率幅是

$$\begin{aligned} A^{(3)}_{+,-} &= \int_{-\beta}^{\beta} \mathrm{d}\tau_1 \int_{-\beta}^{\tau_1} \mathrm{d}\tau_2 \int_{-\beta}^{\tau_2} \mathrm{d}\tau (C^2)^3 \mathrm{e}^{-3W} \mathrm{e}^{-2E\beta} \\ &= \frac{1}{3!} C^3 \mathrm{e}^{-3W} \mathrm{e}^{-2E\beta} \end{aligned} \tag{5.5.38}$$

对所有瞬子几率幅求和得到总几率幅

$$A_{+,-} = \sum_{0}^{\infty} A^{(2n+1)}_{+,-} = \mathrm{e}^{-2E\beta} \sinh(2\beta) C^2 \mathrm{e}^{-W} \tag{5.5.39}$$

隧穿劈裂是

$$\Delta E = 2C^2 \mathrm{e}^{-W} \tag{5.5.40}$$

代入双势阱和 sine-Gordon 势规一化常数的表达式，隧穿劈裂公式分别是

双势阱

$$\Delta E = \frac{m\sqrt{1+u}}{\mathcal{K}(k')} \mathrm{e}^{\frac{4m^3}{3\eta}\sqrt{1+u}[\mathcal{E}(k) - u\mathcal{K}(k)]} \tag{5.5.41}$$

sine-Gordon 势

$$\Delta E = \frac{1}{2\mathcal{K}(k')} \mathrm{e}^{-\frac{8}{g^2}} [\mathcal{E}(k) - k'^2 \mathcal{K}(k)] \tag{5.5.42}$$

5.5.4　高低能极限

能量 $E = 0$ 时，周期瞬子解退化为基态瞬子解，而当能量等于势垒高度时，趋于一平庸的常数解

$$\phi_c = 0 \tag{5.5.43}$$

它位于势垒顶部，是不稳定解，随时准备跌落，所以称为“spheleron”，描述翻越势垒顶部的经典跃迁。周期瞬子介于基态瞬子和“spheleron” 之间。当能量远小于势垒高度时

$$E \ll \frac{m^4}{2\eta^2} \quad (\text{双势阱})$$

$$E \ll \frac{2}{g^2} \quad (\text{sine-Gordon 势})$$

在两种势情况下，都有

$$k \to 1$$

即

$$k' \to 0$$

把完全椭圆积分展开成 k' 幂级数

$$\mathcal{E}(k) = 1 + \frac{1}{2}\left[\ln\left(\frac{4}{k'}\right) - \frac{1}{2}\right]k'^2 + \frac{3}{16}\left[\ln\left(\frac{4}{k'}\right) - \frac{13}{12}\right]k'^4 + \cdots \tag{5.5.44}$$

$$\mathcal{K}(k') = \ln\left(\frac{4}{k'}\right) + \frac{1}{4}\left[\ln\left(\frac{4}{k'}\right) - 1\right]k'^2 + \cdots \tag{5.5.45}$$

用谐振子近似量子化条件

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega \tag{5.5.46}$$

其中

$$\omega = \sqrt{\frac{\partial^2 V(\phi_\pm)}{\partial \phi^2}}$$

是在 $\phi_\pm$ 点展开的小振荡频率，和 Stirling 公式

$$n! = \sqrt{2\pi}\left(\frac{n + \frac{1}{2}}{e}\right)^{n+\frac{1}{2}}$$

低能极限下双势阱和 sine-Gordon 势的第 n 个能级的隧穿劈裂分别是：

双势阱

$$\Delta E_n = \frac{2\sqrt{2}m}{\sqrt{\pi}n!}\left[\frac{2^2}{g^2}\right]^{n+\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{4}{3g^2}} \tag{5.5.47}$$

sine-Gordon 势

$$\Delta E_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}n!}\mathrm{e}^{\frac{8}{g^2}}\left[\frac{2^5}{g^2}\right]^{n+\frac{1}{2}} \tag{5.5.48}$$

双势阱和 sine-Gordon 势的第 n 个能级的隧穿劈裂可用一统一公式表示：

$$\Delta E_n = \frac{1}{n!}B^n \Delta E_0, \quad B = \frac{2^4 \Delta U}{\omega} \tag{5.5.49}$$

其中

$$\omega = \begin{cases} 2m \\ 1 \end{cases}$$

分别是双势阱和 sine-Gordon 势势阱底部的小振动频率。而

$$\Delta U = \begin{cases} \dfrac{m^4}{2\eta^2} \\ \dfrac{2}{g^2} \end{cases}$$

则是相应的隧穿势垒高度。激发态的量子隧穿可理解为系统被热激发到激发态, 量子隧穿在激发态进行, 称为热助量子隧穿。给定温度下隧穿率可用热平均方法得到。

5.6 周期 bounce 和激发态量子隧穿衰变

激发态量子隧穿衰变仍然需要相应的周期解，以反转双势阱为例, 积分一次后运动方程为

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 - V(\phi_c) = -E_c$$

积分参数可看作粒子能量，其值

$$E_c = \frac{1}{2}a^2\mu^2u^2$$

介于零和势垒高度之间

$$\frac{1}{2}\mu^2a^2 \geqslant E_c \geqslant 0$$

其中

$$u = \frac{1-k^2}{1+k^2}, \quad 1 \geqslant k \geqslant 0$$

经典解是

$$\phi_c = s(k)\,\mathrm{dn}[b(k)\tau] \tag{5.6.1}$$

Jacobi 椭圆函数的模是

$$\gamma^2 = \frac{4k}{(1+k)^2}$$

$$\gamma'^2 = 1-\gamma^2 = \left[\frac{1-k}{1+k}\right]^2 = \frac{1-u'}{1+u'}$$

$$u'^2 = 1-u^2$$

而

$$b(k) = \frac{\mu}{a}s(k)$$

$$s(k) = \frac{a(1+k)}{\sqrt{1+k^2}} = a\left[\frac{2}{1+\gamma'^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

5.6.1 微扰算符的本征态和本征值, 多重负模

二阶微扰本征方程

$$\hat{M}\psi = \omega^2\psi$$

$$\hat{M} = -\frac{\mathrm{d}^2\tau}{\mathrm{d}\tau^2} + \mu^2\left[2 - \frac{6}{a^2\phi_c^2}\right] \tag{5.6.2}$$

可化为一 Lamé 方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{dz^2} + [\omega^2 - 6\gamma^2 \overset{2}{\mathrm{sn}}(z)]\psi = 0 \tag{5.6.3}$$

ω^2 是能量本征值, ω 则是围绕经典周期解 ϕ_c 的小振动频率，而

$$z = b(k)\tau$$

是引入的新变量。5 个分离的本征函数 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_5$ 分别是

$$\mathrm{sn}(z)\,\mathrm{cn}(z), \quad \mathrm{sn}(z)\,\mathrm{dn}(z),$$

$$\mathrm{cn}(z)\,\mathrm{dn}(z)$$

和

$$[\mathrm{sn}(z)]^2 - \frac{1}{3\gamma^2}[1 + \gamma^2 \pm \sqrt{1 - \gamma^2\gamma'^2}] \tag{5.6.4}$$

而相应的本征值 $\omega_1^2, \omega_2^2 \cdots, \omega_5^2$ 则为

$$0, \quad -\frac{3\mu^2(1-k^2)^2}{1+k^2}, \quad -\frac{3\mu^2(1+k^2)^2}{1+k^2}$$

和

$$-2\mu^2 \mp 2\mu^2\frac{\sqrt{1+14k^2+k^2}}{1+k^2} \tag{5.6.5}$$

我们得到 3 个负模。产生能量虚部，只需要也仅需要一个负模，多余的负模可由微扰展开的边条件要求

$$\chi(\tau_{\mathrm{i}}) = \chi(\tau_{\mathrm{f}}) = 0$$

除去, 模为 γ 的 Jacobi 椭圆函数的周期是

$$\mathcal{T} = 4\mathcal{K}(\gamma)$$

根据前面周期 bounce 解边条件的选取, 显然要求当

$$z_{\mathrm{i}} = -2\mathcal{K}, \quad z_{\mathrm{f}} = 2\mathcal{K}$$

时微扰波函数为零, 只有零模和一个负模 ψ_2 满足边条件的要求, 因而对量子隧穿衰变有贡献。

5.6.2　激发态量子隧穿衰变率的计算

我们从周期 bounce 量子隧穿跃迁矩阵元

$$A = \langle E|\mathrm{e}^{-2\beta\hat{H}}|E\rangle = \mathrm{e}^{-2E\beta} \tag{5.6.6}$$

出发，对应的路径积分表示是

$$A = \int \psi_E^*(\phi_\mathrm{f})\psi_E(\phi_\mathrm{i})K(\phi_\mathrm{f},\tau_\mathrm{f};\phi_\mathrm{i}'\tau_\mathrm{i})\mathrm{d}\phi_\mathrm{f}\mathrm{d}\phi_\mathrm{i} \tag{5.6.7}$$

势垒中波函数仍用 WKB 近似

$$\begin{aligned}\psi_E(\phi_\mathrm{f}) &= C\frac{\mathrm{e}^{-\int_t^{\phi_\mathrm{f}}\dot{\phi}\mathrm{d}\phi}}{\sqrt{\dot{\phi}_\mathrm{f}}}\\ \psi_E(\phi_\mathrm{i}) &= C\frac{\mathrm{e}^{-\int_t^{\phi_\mathrm{i}}\dot{\phi}\mathrm{d}\phi}}{\sqrt{\dot{\phi}_\mathrm{i}}}\end{aligned} \tag{5.6.8}$$

归一化常数定义为

$$C = \left[\frac{1}{2}\int_{-t}^{t}\frac{\mathrm{d}\phi}{\sqrt{2[E_c - V(\phi)]}}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.6.9}$$

而

$$t = \frac{a(1-k)}{\sqrt{1+k^2}},\quad t' = \frac{a(1+k)}{\sqrt{1+k^2}}$$

是如图 5.6.1 所示的 bounce 反转点。

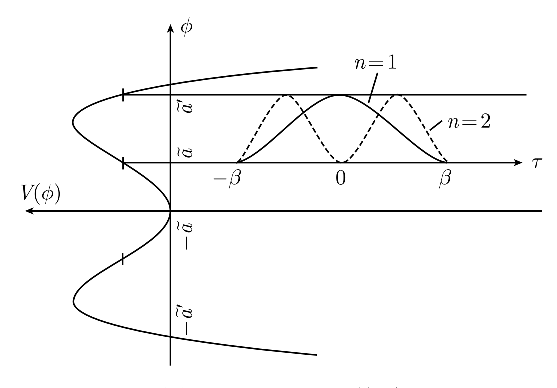


图 5.6.1　bounce 轨道

传播子用定态相位微扰算到单圈近似, 经典作用量是

$$S_c = W + 2\beta E_c \tag{5.6.10}$$

取端点极限

$$\tau_{\mathrm{i}} \to -\beta; \quad \tau_{\mathrm{f}} \to -\beta$$

$$\phi_{\mathrm{i}} \to \tilde{a}; \quad \phi_{\mathrm{f}} \to \tilde{a}$$

把端点函数按 $(\phi_{\mathrm{f}} - \tilde{a})$ 的幂级数展开到二阶, 完成端点积分, 得到单个 bounce 的隧穿几率幅

$$A^{(1)} = -\mathrm{i}2\beta C^2 \mathrm{e}^{-W} \mathrm{e}^{-2E_c\beta} \tag{5.6.11}$$

n 个 bounce 量子隧穿跃迁几率幅是

$$A^{(n)} = (-\mathrm{i})^n (C^2)^2 \frac{2\beta}{n!} \mathrm{e}^{-nW} \mathrm{e}^{-2\beta E_c} \tag{5.6.12}$$

总的隧穿几率幅

$$A = \sum_{n=0}^{\infty} A^{(n)} = \mathrm{e}^{-2\beta E_c} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\beta C^2 \mathrm{e}^{-W}} \tag{5.6.13}$$

和方程 (5.6.6) 比较, 能量虚部是

$$\Im E = C^2 \mathrm{e}^{-W} \tag{5.6.14}$$

W 可沿周期 bounce 积分得到, C^2 也由势阱中两反转点间的积分计算, 结果是

$$W = \frac{2^{\frac{5}{2}}}{3} \frac{\mu a^2}{(1+\gamma'^2)^{\frac{3}{2}}} \{(2-r^2)\mathcal{E}[\mathcal{K}(\gamma)] - 2\gamma'^2 \mathcal{K}(\gamma)\} \tag{5.6.15}$$

$$C^2 = \frac{\mu(1+k)}{4\sqrt{1+k^2}\mathcal{K}(\gamma')} \tag{5.6.16}$$

5.6.3 高低能极限

当积分常数 (能量) 等于势垒高度时

$$E_c = \frac{1}{2} a^2 \mu^2$$

在这种情况下的 spheleron 常数解是

$$\phi_c = a$$

它描述翻越势垒的经典跃迁过程, 周期解介于 “spheleron” 和基态 bounce 之间。低能情况下

$$E_c \ll \frac{1}{2} a^2 \mu^2$$

即

$$k \to 1$$

和

$$\gamma \to 1, \quad \gamma' \to 0$$

把完全椭圆积分展开成 γ' 幂级数

$$\mathcal{E}(\gamma)=1+\frac{1}{2}\left[\ln\left(\frac{4}{\gamma'}\right)-\frac{1}{2}\right]\gamma'^2+\frac{3}{16}\left[\ln\left(\frac{4}{\gamma'}\right)-\frac{13}{12}\right]\gamma'^4+\cdots \tag{5.6.17}$$

$$\mathcal{K}(\gamma)=\ln\left(\frac{4}{\gamma'}\right)+\frac{1}{4}\left[\ln\left(\frac{4}{\gamma'}\right)-1\right]\gamma'^4+\cdots \tag{5.6.18}$$

用 Bohr-Sommerfeld 量子化条件

$$\int_{-t}^{t}\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}\phi=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi \tag{5.6.19}$$

不难得出能谱是

$$E_c=\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega \tag{5.6.20}$$

其中

$$\omega=\sqrt{\frac{\partial^2 V(\phi)}{\partial\phi^2}}|_{\phi=0}=\mu\sqrt{2}$$

正是势阱内的小振动频率。

第 n 个低激发态能级的虚部是

$$\Im E=\frac{\mu}{\sqrt{\pi}n!}\left[\frac{16\sqrt{2}}{g^2}\right]^{n+\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{-4\sqrt{2}}{3g^2}} \tag{5.6.21}$$

5.7 量子隧穿几率幅计算的 LSZ 方法

双势阱激发态共振隧穿几率幅也可用场论中的 LSZ(Lehmann, Symanzik, Zimmermann) 方法仅借助基态瞬子得到，但须计算到高阶微扰。我们把势垒量子隧穿看作一散射过程, 需要计算 S 散射矩阵, 对于简并态间的共振隧穿, $t\to\pm\infty$ 的渐近态是相邻势阱中的谐振子态。场算符的时间演化和按谐振子基展开的场粒子产生算符在相互作用绘景中可用时间微分关联起来，从而建立 S 散射矩阵和 Green 函数的关系, 称为 LSZ 约化方法。对于 $1+0$ 维谐振子场, Hamilton 算符是

$$H=\frac{1}{2}\pi^2+\frac{1}{2}\omega^2\phi^2=\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right) \tag{5.7.1}$$

场算符 $\phi(t)$ 的时间演化可求解 Heisenberg 方程精确得到

$$\phi(t)=\frac{1}{\sqrt{2\omega}}(a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+a^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}) \tag{5.7.2}$$

产生算符和场算符的时间演化关系是

$$a^\dagger = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\omega}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}[\dot{\phi}(t) + \mathrm{i}\omega\phi(t)] \equiv -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\omega}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\ \overset{\leftrightarrow}{\frac{\partial}{\partial t}}\ \phi(t) \tag{5.7.3}$$

双向偏导算符 $\overset{\leftrightarrow}{\frac{\partial}{\partial t}}$ 表示向右的时间偏导减去向左的。

LSZ 方法的好处是仅借助基态瞬子即可得到低激发态共振隧穿率, 无须引入周期解。我们以 sine-Gordon 势

$$V(\phi) = \frac{1}{g^2}[1 + \cos(g\phi)] \tag{5.7.4}$$

为例来解释 LSZ 方法在量子隧穿计算中的应用。把势场在相邻势阱最小值 $\pm\frac{\pi}{g}$ 邻域展开到二阶近似

$$V(\phi) = \frac{1}{2}\left[\phi - \left(\pm\frac{\pi}{g}\right)\right]^2 \tag{5.7.5}$$

围绕极小值的振动频率是 $\omega = 1$。关键是需要用瞬子解来构造 $\tau \to \pm\infty$ 的渐进场变量, 我们选

$$\phi_\mp = \frac{\pi}{g} \pm \phi_c \tag{5.7.6}$$

其中

$$\phi_c = \arcsin[\tanh(\tau)] \tag{5.7.7}$$

是基态瞬子, 这样选取的目的是保证渐进场变量满足极限条件

$$\lim_{\tau\to\pm\infty} \phi_\mp = 0 \tag{5.7.8}$$

隧穿场只在势垒内不为零。定义相应的准 (虚时) Bose 子产生和湮灭算符

$$a_\pm^\dagger = \sqrt{2}\mathrm{e}^{-\tau}\ \overset{\leftrightarrow}{\frac{\partial}{\partial \tau}}\ \phi_\pm(\tau) \tag{5.7.9}$$

$$a_\pm = -\sqrt{2}\mathrm{e}^{\tau}\overset{\leftrightarrow}{\frac{\partial}{\partial \tau}}\phi_\pm(\tau) \tag{5.7.10}$$

和隧穿场的关系是

$$2\phi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}[a_\pm\mathrm{e}^{-\tau} + a_\pm^\dagger\mathrm{e}^{\tau}] \tag{5.7.11}$$

因为

$$\frac{\partial\phi_\pm}{\partial\tau} = \mp\frac{2}{g\cosh(\tau)}|_{\tau\to\pm\infty} \to \mp\frac{4}{g}\mathrm{e}^{\mp\tau} \tag{5.7.12}$$

因而有

$$a_+^\dagger|_{\tau\to-\infty} \to \frac{4\sqrt{2}}{g} \tag{5.7.13}$$

$$a_-^\dagger|_{\tau\to\infty} \to \frac{4\sqrt{2}}{g} \tag{5.7.14}$$

而

$$a_+|_{\tau\to\infty} = 0 \tag{5.7.15}$$

$$a_-^\dagger|_{\tau\to-\infty} = 0 \tag{5.7.16}$$

物理意义非常清楚, 它描述由势阱 “–” 到势阱 “+” 的准粒子传播, 几率幅是

$$\frac{4\sqrt{2}}{g}$$

正是我们希望的结果。我们的目的是计算从势阱 “–” 到势阱 “+” 通过中间势垒的一个准 Bose 子隧穿几率幅, 记为,

$$A_{\mathrm{f,i}} = S_{\mathrm{f,i}}\mathrm{e}^{2\beta} \tag{5.7.17}$$

S 矩阵元的定义是

$$S_{\mathrm{f,i}} = \lim_{\substack{\tau\to-\infty\\ \tau'\to\infty}} \langle 0|a_+(\tau')a_-^\dagger(\tau)|0\rangle \tag{5.7.18}$$

代入 Bose 子产生和湮灭算符时间演化的微分算符表示

$$S_{\mathrm{f,i}} = \lim_{\substack{\tau\to-\infty\\ \tau'\to\infty}} \left[-\sqrt{2}\mathrm{e}^{\tau'}\frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial\tau'}\right]\left[\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\tau}\frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial\tau}\right]G(\tau',\tau) \tag{5.7.19}$$

两点 Green 函数是

$$G(\tau',\tau) = \langle 0|\phi_+(\tau')\phi_-(\tau)|0\rangle = 2\sqrt{\pi}\phi_+(\tau')\phi_-(\tau)K \tag{5.7.20}$$

在矩阵元中的 $\phi(\tau)$ 是场算符, 而等式右边的是场算符的本征值, K 表示瞬子传播子, 前面的因子来自端点积分。因为

$$\lim_{\tau\to-\infty}\phi_-(\tau) = 0, \quad \lim_{\tau'\to\infty}\phi_+(\tau) = 0$$

因而

$$\lim_{\substack{\tau\to-\infty\\ \tau'\to\infty}} G(\tau',\tau) = 0 \tag{5.7.21}$$

在此极限下, 显然 Green 函数对时间的一次求导也为零, 不为零的是

$$\begin{aligned}\lim_{\substack{\tau\to-\infty\\ \tau'\to\infty}} \frac{\partial^2 G}{\partial\tau'\partial\tau} &= 2\sqrt{\pi}K\left[\lim_{\tau'\to\infty}\frac{\partial\phi_+(\tau')}{\partial\tau'}\right]\left[\lim_{\tau\to-\infty}\frac{\partial\phi_-(\tau)}{\partial\tau}\right]\\ &= -2\sqrt{\pi}K\left(\frac{4}{g}\right)^2\mathrm{e}^{-2\beta}\end{aligned} \tag{5.7.22}$$

其中利用了 $\phi_\pm$ 的表达式和零模的极限值。一个 Bose 子隧穿几率幅

$$A_{\mathrm{f,i}}^{(1)}=\left(\frac{4\sqrt{2}}{g}\right)^2\mathrm{e}^{-2\beta}\sqrt{\pi}K=S_{\mathrm{f,i}}^{(1)}\mathrm{e}^{-2\beta} \tag{5.7.23}$$

n 个 Bose 子隧穿几率幅

$$A_{\mathrm{f,i}}^{(n)}=S_{\mathrm{f,i}}^{(n)}\mathrm{e}^{-n2\beta} \tag{5.7.24}$$

n 个 Bose 子隧穿 S 矩阵是

$$\begin{aligned}S_{\mathrm{f,i}}^{n}&=\frac{1}{n!}\prod_{i=1}^{n}\lim_{\substack{\tau_{\mathrm{i}}\to-\infty\\ \tau'_{\mathrm{i}}\to\infty}}\left[-\sqrt{2}\mathrm{e}^{\tau'_{\mathrm{i}}}\frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial\tau'_{\mathrm{i}}}\right]\times\left[\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\tau_{\mathrm{i}}}\frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial\tau_{\mathrm{i}}}\right]G(\tau'_1,\tau'_2,\cdots,\tau'_n;\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_n)\\&=\frac{1}{n!}\left[\frac{4\sqrt{2}}{g}\right]^{2n}\sqrt{\pi}K\end{aligned} \tag{5.7.25}$$

用前面给出的单个瞬子的传播子公式

$$K=\frac{2\beta}{\pi}\mathrm{e}^{\frac{-8}{g^2}}\mathrm{e}^{-\beta}\frac{4}{g} \tag{5.7.26}$$

及隧穿几率幅和能级劈裂的关系, 可得到和周期瞬子方法完全一样的隧穿劈裂 (方程 5.5.48)。

5.8 量子隧穿的有限温度理论

基态隧穿是零温纯量子过程, 当温度升高, 粒子被激发到激发态, 量子隧穿在激发态进行, 称为热助量子隧穿。给定温度 T 的隧穿率可用 Boltzmann 热平均计算

$$\Gamma(T)=\frac{\Delta E_0}{\pi Z}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{B^n}{n!}\mathrm{e}^{\frac{-\epsilon n}{T}} \tag{5.8.1}$$

$$\epsilon_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega_0$$

是势阱中谐振子近似能级, 小振动频率是 ω_0, Z 是谐振子配分函数, Boltzmann 常数 $k_{\mathrm{B}}=1$

$$B=\frac{\Delta U2^4}{\omega_0} \tag{5.8.2}$$

ΔU 是隧穿势垒高度。

$$\Gamma(T)=\frac{\Delta E_0}{\pi}[1-\mathrm{e}^{-\frac{\omega_0}{T}}]\mathrm{e}^{B\mathrm{e}^{-\frac{\omega_0}{T}}} \tag{5.8.3}$$

因为隧穿劈裂公式只在低激发态适用, 温度 T 的隧穿率也仅可用于低温区。温度提高应使用周期瞬子。

5.8.1 从量子隧穿到经典热跃迁的过渡——相变过程

零温时只有基态隧穿，在极低温度时是纯量子隧穿过程，随着温度升高激发态隧穿发生，即热助量子隧穿, 随着温度继续升高，同时伴有随着翻越势垒的经典热跃迁过程。经典热跃迁率服从 Arrhenius 定律

$$\varGamma_{\mathrm{th}} \sim \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{th}}(T)} \tag{5.8.4}$$

其中

$$S_{\mathrm{th}}(T) = \frac{\Delta U}{T} \tag{5.8.5}$$

ΔU 是势垒高度。当温度高于某一转变温度时，则完全由经典热跃迁主导。从纯量子隧穿到经典热跃迁是一相变过程，是由隧穿率和给定温度激发态的占居率两个机制竞争产生的：能量提高隧穿率增加，因为瞬子运动路径变短，作用量减少，但高能态的占据率变小。从周期瞬子周期和能量关系，很容易解释经典–量子过渡的相变问题。

5.8.2 瞬子周期和温度的关系

根据瞬子理论, 能量为 E 的激发态隧穿率零级近似 (WKB) 是

$$\varGamma(E) \sim \mathrm{e}^{-W(E)-\beta E} \tag{5.8.6}$$

其中, 瞬子周期 $\beta(E)$ (即前面的 2β) 也是能量的函数, $W(E)$ 是 WKB 作用量，而 $\mathrm{e}^{-W(E)}$ 则是 WKB 隧穿率。另一方面按 Boltzmann 热平均

$$\varGamma(E) \sim \mathrm{e}^{-W(E)-\frac{E}{T}} \equiv \mathrm{e}^{-S_c(T)} \tag{5.8.7}$$

因而

$$T = \frac{1}{\beta} \tag{5.8.8}$$

$S_c(T)$ 表示热助量子隧穿作用量, 当 $T = 0$ 时, $S_c(T = 0) \equiv S_c$ 就是基态瞬子作用量, 是纯量子隧穿过程。

对于对称双势阱模型, 瞬子周期随能量增加单调下降, 纯量子隧穿随温度升高连续过渡到经典热跃迁, 即

$$S_c \to S_c(T) \to S_{\mathrm{th}}(T) \tag{5.8.9}$$

是一个二级相变过程, 即 Landau 二级相变。瞬子周期和能量，作用量和温度曲线如图 5.8.1 所示。

可以定义序参数

$$h = \frac{\Delta U - E}{\Delta U} \tag{5.8.10}$$

h 称为量子隧穿序, $h = 1$ 是纯量子隧穿，对应作用量 S_c, 而，$h = 0$ 是经典热跃迁, 对应 $S_{\mathrm{th}}(T)$, 两者之间则是热助量子隧穿 $S_c(T)$。

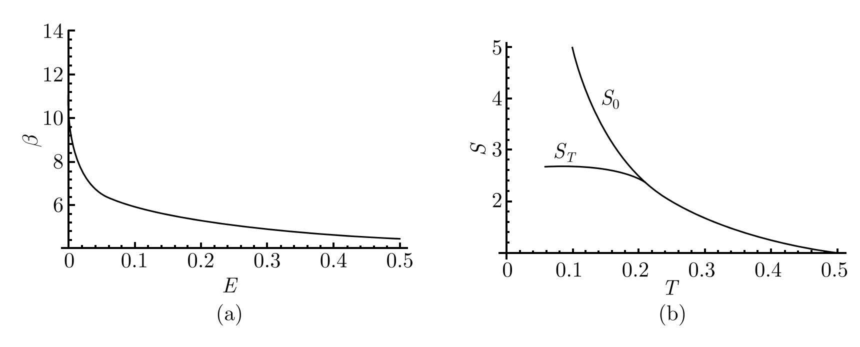


图 5.8.1 瞬子周期和能量，作用量和温度曲线图

5.9 分子磁体宏观量子效应

随着半导体微电子技术的发展，磁性材料的制备和研究已进入纳米尺度。低温下纳米磁体已表现出明显的量子特性，纳米磁体磁化矢量的隧穿即一个宏观量子现象。量子态相位及相干是量子力学的核心概念，也是量子信息工程的基础。是否存在宏观可区分态，即 Schrödinger 猫态的相干叠加是自量子力学建立以来极具挑战性的问题。20 世纪 80 年代，Leggett 等指出，宏观可区分态的相干叠加可通过量子隧穿实现，也就是说，宏观上稳定的态之间可通过量子隧穿相干关联。随着单畴磁体中隧穿率理论计算的研究进展，纳米磁体中宏观量子效应的实验和动力学理论研究成为近年来的热点课题。其实，早在 20 世纪 50 年代就有关于磁的宏观量子效应的推测，但由于理论和实验方面的困难，没有引起重视。纳米磁体中的宏观量子效应指磁化矢量 (宏观可测量) 的量子隧穿和磁化矢量在稳定取向 (即宏观量子态) 之间通过量子隧穿往复振荡 (宏观量子相干)。实验上观察到的磁滞回线量子化台阶 (图 5.8.2) 和磁化矢量相干隧穿引起的共振吸收谱，以及磁弛豫时间的低温反常 (图 5.8.3) 是公认的宏观量子现象。纳米磁体宏观量子效应实验可用来检验量子力学的基本原理和宏观极限，同时和信息储存技术密切相关。原则上每个单畴纳米磁体可以储存一个比特信息，其中磁化矢量的两个稳定取向作为储存单元的两个状态。无外场作用时两状态保持稳定，因而可储存信息。为提高计算速度和增加存储密度，必须减小存储单元尺度。当尺度小到出现量子隧穿时，磁化矢量通过量子隧穿自动翻转，信息遗失。因此，宏观量子相干隧穿最终限制了信息存储密度和计算速度。早期实验多用天然磁性颗粒，如在平均尺度 15nm 的铁磁颗粒 (Tb、Ce、Fe) 中观察到低温下弛豫时间不随温度变化的反常现象 (图 5.8.3)。但是在天然和人造磁性颗粒中做的宏观量子相干实验，因铁朊颗粒缺乏全同性，未能得到令人信服的结果。近几年来的重大发现是，某些磁性大分子，如 Mn_{12}、Fe_8 等可被看作单畴磁性粒子。在阻塞温度之下，单个磁性分子既表现出宏观磁体特性，如

磁滞回线，也呈现纯量子行为，如磁化矢量量子隧穿和宏观量子态相干。分子磁体有稳定的结构和优良的全同性，成为目前磁性宏观量子效应实验的首选材料。量子隧穿导致宏观量子态相干叠加，这正是量子计算所要求的特性。而从信息存储的观点，量子隧穿则引起信息遗失。因而在实验和理论研究的基础上建立和环境耦合的单分子磁体动力学理论，进而形成控制单分子量子特性的技术，有重要的学术意义和技术应用价值。

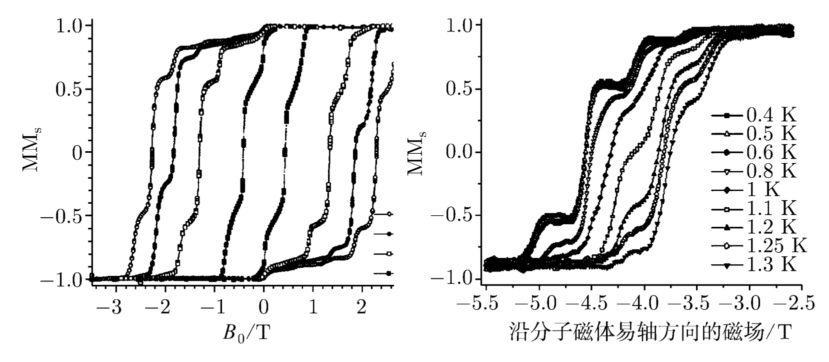


图 5.8.2 磁滞回线的量子化台阶

图 5.8.2 和图 5.8.3 摘自 www.mrs.org/bulletin/November, 2000.

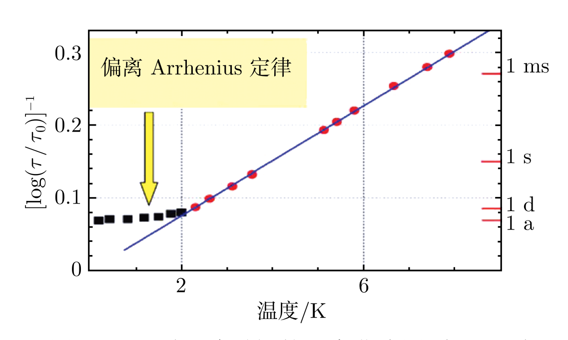


图 5.8.3 磁弛豫时间的温度曲线图, 低温反常

5.9.1 宏观量子隧穿

单磁畴粒子的磁矩是一个宏观观察量, 磁矩的量子隧穿就是一个宏观量子效应, 实验观察到的磁弛豫时间低温反常 (正常弛豫时间的对数随温度线性变化, 低温时和温度无关 (图 5.8.3)) 和磁滞回线的量子化台阶等都只能用宏观量子隧穿来解释。

5.9.2 宏观量子态和宏观量子相干——Schrödinger 猫态的分子磁体实现

用分子磁体已成功实现了宏观量子态相干, 例如，Fe_8 是有双轴各向异性的分

子磁体, 有一难磁化轴 (能量最高) 及和难轴垂直的易磁化平面, 分子磁体可在易磁化平面内旋转, 在平面内有一中间轴, 相对于最低能量轴是一势垒, 最低能量轴称易轴, 经典磁体只能沿易轴的两个平衡取向, 是两个宏观态。量子隧穿可引起这两个宏观态相干叠加, 即 Schrödinger 猫态。我们选 Fe_8 分子磁体的难磁化方向为 z 轴，易磁化方向为 x 轴，则 Fe_8 分子磁体可用下面等效 Hamilton 量描述：

$$\hat{H} = K_1\hat{S}_z^2 + K_2\hat{S}_y^2 \tag{5.9.1}$$

其中各向异性常数均为正值，且

$$K_1 > K_2 > 0$$

若不存在量子隧穿，磁化矢量沿 $\pm x$ 取向是两宏观稳定态，即宏观简并基态，记为 $|\pm\rangle$。磁化矢量 (宏观量) 的量子隧穿导致两简并宏观态相干关联，能级分裂。结果是

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle), \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) \tag{5.9.2}$$

其中，偶态 $|0\rangle$ 能量较低是磁体的基态，而奇态 $|1\rangle$ 是第一激发态。$|0\rangle$，$|1\rangle$ 是宏观量子叠加态，即 Schrödinger 猫态。解含时 Schrödinger 方程容易发现，分子磁体磁化矢量在两易磁化方向 (宏观简并基态) 间往复隧穿振荡，隧穿率是

$$\varGamma = \frac{\Delta E}{2h} \tag{5.9.3}$$

其中, ΔE 表示基态能级的隧穿劈裂，即第一激发态和基态的能量差, h 表示 Planck 常数。图 5.9.1 是宏观量子相干示意图

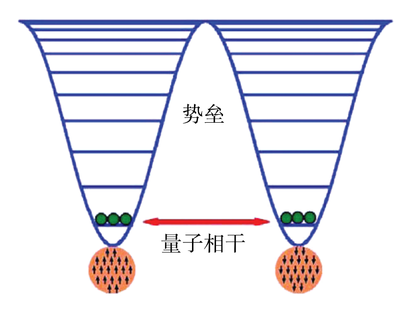


图 5.9.1 宏观量子相干示意图

5.9.3 隧穿率的计算——瞬子方法

我们用瞬子方法可求隧穿劈裂, 即隧穿率。已被实验观测到的新奇结果是自旋宇称效应, 即半整数自旋隧穿劈裂淬灭, 基态简并不能消除, 另外, 沿难轴加磁场时会出现 Aharanov-Bohm 相位干涉效应, 并可用隧穿路径的相位相干解释。

1. 自旋相干态

路径积分需要用自旋的经典变量, 能给出自旋经典变量的自旋态是自旋相干态

$$|\boldsymbol{n}\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\sin\phi\hat{S}_x - \cos\phi\hat{S}_y)}|s,s\rangle = \mathrm{e}^{\frac{\theta}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\hat{S}_- - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\hat{S}_+)}|s,s\rangle \tag{5.9.4}$$

s 是分子磁体总自旋量子数

$$\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$$

是方位角为 θ 和 ϕ 的单位矢量。容易证明

$$\hat{S}|\boldsymbol{n}\rangle = s|\boldsymbol{n}\rangle \tag{5.9.5}$$

$$\hat{S}^2|\boldsymbol{n}\rangle = s(s+1)|\boldsymbol{n}\rangle \tag{5.9.6}$$

和 Bose 算符相干态一样, 自旋相干态不是正交基矢, 有如下的内积关系：

$$\langle\boldsymbol{n}_1|\boldsymbol{n}_2\rangle = \left(\frac{1+\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2}{2}\right)^s \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varPhi(\boldsymbol{n}_1,\boldsymbol{n}_2)} \tag{5.9.7}$$

其中 $\varPhi = sA$, 而 A 是 $\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{n}_2$ 和 $\boldsymbol{n}_0 = (0,0,1)$ 在单位球面上张成的面积。

完备性关系是

$$\int \mathrm{d}\mu(\boldsymbol{n})|\boldsymbol{n}\rangle\langle\boldsymbol{n}| = 1 \tag{5.9.8}$$

中的积分测度是

$$\mathrm{d}\mu(\boldsymbol{n}) = \frac{2s+1}{4\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \tag{5.9.9}$$

2. 自旋相干态的 Dicke 态表示

自旋算符 (大自旋数) 和双组分 Bose 算符之间存在 Schwinger 关系

$$\begin{aligned}\hat{S}_+ &= \hat{b}_1^\dagger\hat{b}_2^\dagger, \quad \hat{S}_- = \hat{b}_2^\dagger\hat{b}_1 \\ \hat{S}_z &= \frac{1}{2}(\hat{b}_1^\dagger\hat{b}_1 - \hat{b}_2^\dagger\hat{b}_2)\end{aligned} \tag{5.9.10}$$

近来在双势阱中的 Bose-Einstein 凝聚 (BEC) 和光腔中冷原子的量子相变研究中十分有用, Dicke 态 $|s,m\rangle$ 可用 Bose 子算符从真空态中产生

$$|s,m\rangle = \frac{1}{\sqrt{(s+m)!(s-m)!}}(\hat{b}_1^\dagger)^{s+m}(\hat{b}_2^\dagger)^{s-m}|0\rangle \tag{5.9.11}$$

而自旋相干态则可用 Dicke 态表示为

$$|\boldsymbol{n}\rangle = \sum_{m=-s}^{s}\left(\begin{array}{c}2s\\ s+m\end{array}\right)\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{s+m}\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)^{s-m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(s-m)\phi}|s,m\rangle \tag{5.9.12}$$

3. 自旋相干态路径积分

考虑由自旋相干态 $|\boldsymbol{n}_{\mathrm{i}}\rangle$ 到 $|\boldsymbol{n}_{\mathrm{i}}\rangle$ 的传播子

$$K(\boldsymbol{n}_{\mathrm{f}}, t_{\mathrm{f}}; \boldsymbol{n}_{\mathrm{i}}, t_{\mathrm{i}}) = \langle \boldsymbol{n}_{\mathrm{f}} | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t_{\mathrm{f}} - t_{\mathrm{i}})\hat{H}} | \boldsymbol{n}_{\mathrm{i}} \rangle \tag{5.9.13}$$

把时间分为无限小间隔

$$\epsilon = \lim_{N \to \infty} \frac{t_{\mathrm{f}} - t_{\mathrm{i}}}{N}$$

插入自旋相干态完备性关系, 得到

$$K = \int \left[\prod_{k=1}^{N-1} \mathrm{d}\mu(\boldsymbol{n}_k) \right] \langle \boldsymbol{n}_{\mathrm{f}} | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}} | \boldsymbol{n}_{N-1} \rangle \langle \boldsymbol{n}_{N-1} | \cdots \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}} | \boldsymbol{n}_1 \rangle \langle \boldsymbol{n}_1 | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\epsilon\hat{H}} | \boldsymbol{n}_{\mathrm{i}} \rangle \tag{5.9.14}$$

用相干态的内积公式

$$\langle \boldsymbol{n}_k | \boldsymbol{n}_{k-1} \rangle = \left(\frac{1 + \boldsymbol{n}_k \cdot \boldsymbol{n}_{k-1}}{2} \right)^s \mathrm{e}^{\mathrm{i}sA(\boldsymbol{n}_k, \boldsymbol{n}_{k-1})} \tag{5.9.15}$$

不难看出

$$A(\boldsymbol{n}_k, \boldsymbol{n}_{k-1}) \approx (\phi_k - \phi_{k-1})[1 - \cos\theta_k] \tag{5.9.16}$$

而

$$\boldsymbol{n}_k \cdot \boldsymbol{n}_{k-1} \approx 1$$

在 $\epsilon \to 0$ 极限情况下, 自旋算符作用在自旋相干态上, 得到相应的本征值，传播子变为

$$K = \int \left[\prod_{k=1}^{N-1} \mathrm{d}\mu(\boldsymbol{n}_k) \right] \times \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\sum_{k=1}^{N} S(\phi_k - \phi_{k-1})(\cos\theta_k - 1) - H(\theta_k, \phi_k)\epsilon]} \tag{5.9.17}$$

引入一对共轭正则变量

$$\phi, \quad p = s\cos\theta$$

其正确性, 很容易通过计算经典自旋

$$S_x = s\sin\theta\cos\phi, \quad S_y = s\sin\theta\sin\phi, \quad S_z = s\cos\theta$$

满足的 Poisson 括号

$$\{S_{\mathrm{i}}, S_j\} = \sum_k \epsilon_{i,j,k} S_k$$

来验证。传播子可形式上写为

$$K = \int \mathcal{D}[\phi]\mathcal{D}[p]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(S + S_{\mathrm{WZ}})} \tag{5.9.18}$$

其中

$$S=\int_{t_{\mathrm{i}}}^{t_{\mathrm{f}}}[p\dot{\phi}-H(\phi,p)]\mathrm{d}t \tag{5.9.19}$$

表示经典作用量, 而

$$S_{\mathrm{WZ}}=\int\dot{\phi}\mathrm{d}t \tag{5.9.20}$$

称为 Wess-Zummino 拓扑作用量, 若 $S=$ 整数, 它没有观测效应, 对于半整数自旋系统则产生相位相干。当系统的动量是二次式时，动量积分变为 Gauss 积分可积出。

作业 5.5　证明变量 ϕ 和 p 的 Poisson 括号 $\{\phi,p\}=1$ 仅在大自旋近似 $(S\to\infty)$ 下成立。

4. 自旋宇称效应 —— 半整数自旋的隧穿劈裂淬灭

我们用自旋相干态路径积分计算分子磁体 Fe_8 两简并宏观基态 $|\pm\rangle$ 间的量子隧穿传播子，用自旋相干态和方程 (5.9.1) 的双轴各向异性分子磁体 Fe_8 的 Hamilton 算符，可得到传播子的明显表达式, 作用量中的经典 Hamilton 是

$$H(\phi,p)=\frac{p^2}{2m(\phi)}+V(\phi) \tag{5.9.21}$$

而

$$m(\phi)=\frac{1}{2K_1[1-\lambda\sin^2(\phi)]},\quad \lambda=\frac{K_2}{K_1} \tag{5.9.22}$$

是和空间坐标相关的质量, 势函数

$$V(\phi)=K_2s^2\sin^2\phi \tag{5.9.23}$$

是 ϕ 的周期函数。传播子中动量是 Gauss 型积分, 因而可积出，得到组态空间传播子

$$K=\int\mathcal{D}[\phi]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(S+S_{\mathrm{WZ}})} \tag{5.9.24}$$

作用量是

$$S=\int\left[\frac{m(\phi)}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t}\right)^2-V(\phi)\right]\mathrm{d}t \tag{5.9.25}$$

简并基态间的量子隧穿关联使基态能级展宽成能带。我们考虑 $\phi=0$ 和 $\phi=\pi$ 之间穿越势垒的旋转, 引入虚时

$$\tau=\mathrm{i}t$$

量子隧穿传播子是

$$K_{\mathrm{e}}=\int\mathcal{D}[\phi]\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{e}}+\mathrm{i}S_{\mathrm{WZ}}} \tag{5.9.26}$$

其中

$$S_{\mathrm{e}}=\int\mathcal{L}_{\mathrm{e}}\mathrm{d}\tau \tag{5.9.27}$$

是虚时作用量, 而

$$\mathcal{L}_{\mathrm{e}}=\frac{m(\phi)}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\tau}\right)^2+V(\phi) \tag{5.9.28}$$

表示虚时拉氏量, Wess-Zummino 拓扑作用量变为虚时后形式不变

$$S_{\mathrm{WZ}}=s\int\mathrm{d}\phi \tag{5.9.29}$$

因为 $\pm\pi$ 是空间的同一点, 所以 $\phi=0$ 和 $\phi=\pi$ 之间穿越势垒的旋转有逆时针和顺时针旋转两条路径 (图 5.9.2), 虽然逆时针和顺时针旋转的虚时作用量相等, 但 Wess-Zummino 拓扑作用量却改变符号

$$S_{\mathrm{WZ}}=s\int_0^{\pi}\mathrm{d}\phi=s\pi \tag{5.9.30}$$

而

$$S_{\mathrm{WZ}}=s\int_0^{-\pi}\mathrm{d}\phi=-s\pi \tag{5.9.31}$$

两种转动路径的贡献求平均后得到的量子隧穿传播子为

$$K_{\mathrm{e}}=\cos(s\pi)K_{\mathrm{e}}(\pi,\beta;0,-\beta) \tag{5.9.32}$$

其中

$$K_{\mathrm{e}}(\pi,\beta;0,-\beta)=\int_0^{\pi}\mathcal{D}[\phi]\mathrm{e}^{-\int_{-\beta}^{\beta}[\frac{m(\phi)}{2}(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\tau})^2+V(\phi)]\mathrm{d}\tau} \tag{5.9.33}$$

我们得到非常有趣的量子隧穿宇称效应, 半整数自旋隧穿劈裂淬灭, 这是 Wess-Zummino 拓扑相位干涉的结果。半整数自旋隧穿劈裂淬灭正是 Kramer 简并 —— 具有时间反演不变的半整数自旋系统基态简并不可能解除。

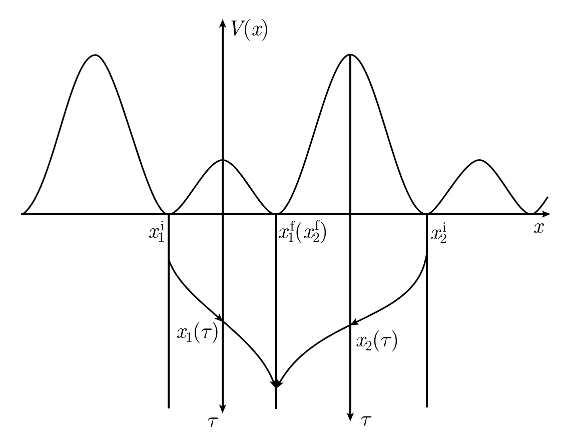


图 5.9.2　顺时针和逆时针势垒下的隧穿旋转

5. 隧穿劈裂的计算 —— 瞬子方法

隧穿传播子可用通常的瞬子方法计算, 瞬子解是

$$\phi_c = \arcsin[\cosh^2 \omega_0\tau - \lambda \sinh^2 \omega_0\tau]^{-\frac{1}{2}} \tag{5.9.34}$$

$$\omega_0^2 = 4K_1K_2s^2$$

沿瞬子轨道计算得到的经典作用量是

$$S_c = \int_{-\infty}^{\infty} m(\phi_c)\dot{\phi}_c^2 \mathrm{d}\tau = s\ln\frac{1+\sqrt{\lambda}}{1-\sqrt{\lambda}} \tag{5.9.35}$$

场论中也称瞬子质量。用定态相位微扰计算到单圈近似的基态隧穿劈裂是

$$\Delta\epsilon = 2^4\left[\frac{3K_1K_2}{(1-\lambda)\pi}\right]^{\frac{1}{2}}\lambda^{\frac{1}{2}}s^{\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-s\ln\frac{1+\sqrt{\lambda}}{1-\sqrt{\lambda}}} \tag{5.9.36}$$

实际的能级劈裂来自两种转动路径的贡献，结果和系统的总自旋数有关

$$\Delta E = \cos s\pi\Delta\epsilon \tag{5.9.37}$$

半整数自旋隧穿劈裂猝灭，也称自旋宇称效应。

6. 宏观量子态相位干涉效应

除自旋宇称效应外，沿 Fe_8 分子磁体难轴方向加磁场也产生一个 Wess-Zumino 类型的拓扑作用项，从而量子态有一个和磁场值有关的 Aharonov-Bohm 相位。宏观量子态相位干涉引起隧穿劈裂随外场振荡，加外场后 Hamilton 算符记为

$$\hat{H} = K_1\hat{S}_z^2 + K_2\hat{S}_y^2 - g\mu_\mathrm{B}B\hat{S}_z \tag{5.9.38}$$

用量子隧穿的瞬子方法可求得隧穿劈裂随外场大小变化的函数关系。B 表示外磁场, g 表示自旋 g 因子，μ_B 是 Bohr 磁子。上节虚时拉氏量中的势能变为

$$V(\phi) = K_2s^2\sin^2\phi - \frac{(g\mu_\mathrm{B}B)^2\lambda\sin^2\phi}{4K_1(1-\lambda\sin^2\phi)} \tag{5.9.39}$$

Wess-Zummino 作用量部分增加了一个由磁场产生的拓扑项, 相应的拉氏量是时间的全导数, 不影响运动方程, 但可产生有观测效应的拓扑相位干涉

$$S_\mathrm{WZ} = s\int\Theta(\phi)\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\tau}\mathrm{d}\tau, \tag{5.9.40}$$

其中

$$\Theta(\phi) = 1 - \frac{g\mu_\mathrm{B}B}{2K_1s(1-\lambda\sin^2\phi)}$$

逆时针和顺时针旋转路径平均的量子隧穿传播子为 (图 5.9.3)

$$K_{\mathrm{e}} = \cos(\pi\Theta)K_{\mathrm{e}}(\pi, \beta; 0, -\beta) \tag{5.9.41}$$

得到一重要的量子隧穿振荡常数

$$\Theta = 1 - \frac{g\mu_{\mathrm{B}}B}{2K_1 s(1-\lambda)} \tag{5.9.42}$$

仅和分子磁体基本参数及外场有关。

隧穿劈裂变为

$$\Delta E = \cos\Theta\Delta\epsilon \tag{5.9.43}$$

外加磁场不仅产生了一个拓扑相位, 而且改变了等效势能, 随磁场增强隧穿势垒降低, 能级劈裂增大。当磁场变化到使 Θ 为半整数时, 隧穿劈裂淬灭, 整数时达到最大值, 能级劈裂随磁场振荡, 周期为

$$\Delta B = \frac{2\sqrt{1-\lambda}K_1}{g\mu_{\mathrm{B}}s} \tag{5.9.44}$$

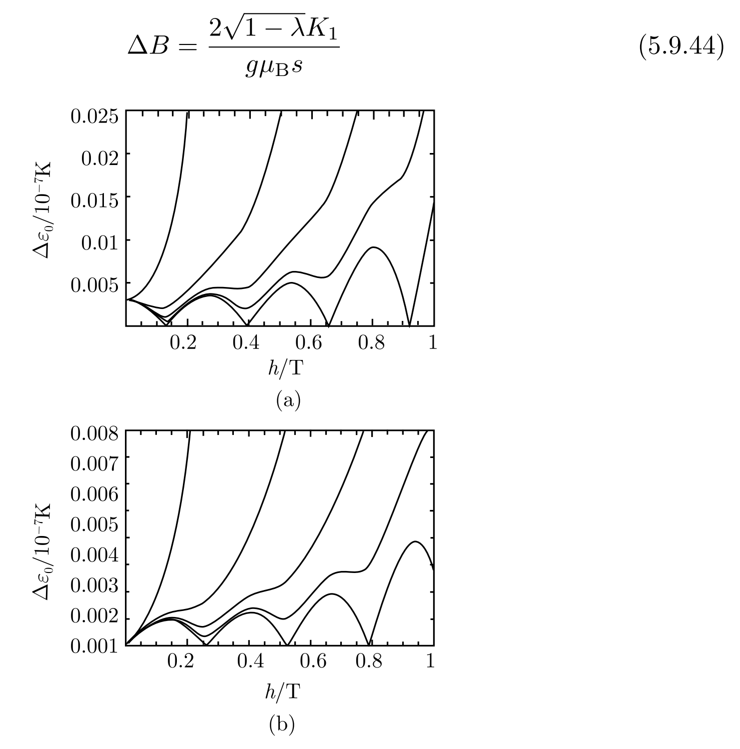


图 5.9.3 基态隧穿劈裂随外场大小和方向角的变化

(a) 整数自旋; (b) 半整数自旋

如果磁场加在难轴和中间轴平面内, 即模型 Hamilton 量 (方程 (5.9.1)) 的 y-z 平面, 磁场方向和难轴 (z 轴) 的夹角记为 γ, 磁场使正 y 轴方向的势垒降低 (图

5.9.2 中 x_2^{i} 和 x_2^{f} 之间的势垒, $x_1(\tau)$ 表示顺时针旋转的瞬子轨道), 而反方向的势垒增高 (图 5.9.2 中 x_2^{i} 和 x_2^{f} 之间的势垒, $x_2(\tau)$ 表示逆时针旋转的瞬子轨道)。用瞬子方法得到如图 5.9.3 所示的分子磁体基态能级量子隧穿劈裂随外场大小和方向角的变化。整数自旋磁体有零场劈裂 (图 5.9.3(a)), 半整数自旋磁体零场劈裂猝灭 (图 5.9.3(b))。由下到上是随方向角 γ 增加的曲线, γ 增大时, 同一外场值在中间轴 (y 轴) 方向的分量变大, 势垒更低, 量子隧穿增强。用非常简单化的模型 Hamilton 量 (方程 (5.9.1)), 瞬子方法给出了和实验结果相当符合的理论曲线 (图 5.9.3)。

7. 等效势方法

除自旋相干态路径积分外, 大自旋系统的能谱还可用自旋的等效势方法计算, 即把自旋算符换成等效的微分算符, 系统可约化为粒子在外势场中的运动。我们以双轴各向异性的分子磁体 $\mathrm{Fe_8}$ 模型 Hamilton 量为例来解释这一方法。在 $\hat{S}_z$ 表象中定态 Schrödinger 方程

$$\hat{H}\Phi(\phi) = E\Phi(\phi) \tag{5.9.45}$$

的生成函数可构造为

$$\Phi(\phi) = \sum_{m=-s}^{s} \frac{C_m}{\sqrt{(s-m)!(s+m)!}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi} \tag{5.9.46}$$

它显然满足边条件

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi s}\Phi(\phi) \tag{5.9.47}$$

整数自旋是周期函数, 而半整数自旋是反周期函数, 即 2π 旋转下改变符号。在这一生成函数上，自旋有如下微分算符形式：

$$\hat{S}_x = s\cos\phi - \sin\phi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi}, \quad \hat{S}_y = s\sin\phi + \cos\phi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi}$$
$$\hat{S}_z = -\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi} \tag{5.9.48}$$

定态 Schrödinger 方程中的自旋用相应的微分算符替代, 则有

$$\begin{aligned}\Bigg[&-(K_1 - K_2\sin^2\phi)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2} - K_2\left(s-\frac{1}{2}\right)\sin(2\phi)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi}\\ &+K_2(s^2\cos^2\phi + s\sin^2\phi)\Bigg]\Phi(\phi) = E\Phi(\phi)\end{aligned} \tag{5.9.49}$$

为消掉一次微分项, 并使等效粒子的质量变为常数, 我们作下面的变换：

$$\Phi(\phi(x)) = [\mathrm{dn}(x)]^s\Psi(x) \tag{5.9.50}$$

新坐标变量定义为第一类不完全椭圆积分

$$x = \int_0^{\phi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{1-\lambda\sin^2\phi}} = F(\phi, k) \tag{5.9.51}$$

$k = \sqrt{\lambda}$ 是椭圆积分的模, $\mathrm{dn}(x)$ 是模为 k 的 Jacobi 椭圆函数。在这一变换下，我们得到势场中的单粒子 Schrödinger 方程为

$$\left[-K_1 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\right] \Psi(x) = E\Psi(x) \tag{5.9.52}$$

其中

$$V(x) = K_2 s(s+1) \frac{\mathrm{cn}^2(x)}{\mathrm{dn}^2(x)} \tag{5.9.53}$$

是 x 变量的周期势函数。相邻势阱间的量子隧穿可用瞬子方法计算。

5.9.4 量子——经典过渡, 一级相变

磁体中的宏观亚稳态衰变和简并宏观量子态之间的相干关联在零温时是纯量子隧穿过程，温度升高，热助隧穿参与，同时伴随着经典热激活过程。随着温度继续升高，经典热跃迁的作用增大，当温度高于某一转变温度时，则完全由经典热激活过程主导。前面已指出，对于通常的势垒, 周期瞬子的周期随能量升高而单调减小, 经典和量子之间的过渡是二级相变过程。分子磁体提供了一级相变存在的物理模型, 我们还以双轴各向异性的分子磁体 Fe_8 模型来论证一级相变的产生。从方程 (5.9.21) 的 Hamilton 量得到能量为 E 的周期瞬子解，能量介于零和势垒高度之间

$$V_0 > E > 0$$

而 $V_0 = K_2 s^2$ 是隧穿势垒高度。周期瞬子解为

$$\phi(\tau) = \arcsin\left[\frac{1 - k^2\,\mathrm{sn}^2(\omega\tau)}{1 - \lambda k^2\,\mathrm{sn}^2(\omega\tau)}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5.9.54}$$

其中 Jacobi 椭圆函数 $\mathrm{sn}(\omega\tau)$ 的模是

$$k = \sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{\xi^2 - \lambda}} = \sqrt{\frac{K_2 s^2 - E}{K_2 s^2 - \lambda E}}$$

$$\xi^2 = \frac{K_2 s^2}{E}$$

$$\omega = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{\lambda}{\xi^2}}, \quad \omega_0^2 = 4K_1 K_2 s^2$$

瞬子周期的表达式为

$$P(E) = \frac{2}{\sqrt{K_1(K_2 s^2 - E\lambda)}} \mathcal{K}(k) \tag{5.9.55}$$

图 5.9.4 是周期随能量变化的数值解 ($K_1 = 1, s^2 = 1000$), 当各向异性常数 $\lambda = 0.3$ 时, 周期随能量的增加单调减小 (图 5.9.4(a))，因而得到二级相变。而 $\lambda = 0.9$ 时,

周期先减小到一极小值后继而增大 (图 5.9.4(b))。这种非单调变化是由势垒形状引起的，并可由各向异性常数的比值 λ 调节。热助量子隧穿作用量随瞬子周期和温度变化的关系可由瞬子解计算为

$$S_c(T) = \frac{E}{T} + 2W(E)$$

$$W = \frac{\omega}{\lambda K_1}[\mathcal{K}(k) - (1 - \lambda k^2)\Pi(\lambda k^2, k)] \tag{5.9.56}$$

而 $\Pi(\lambda k^2, k)$ 是第三类完全椭圆积分。翻越势垒的热跃迁作用量根据定义是

$$S_{\rm th}(T) = \frac{K_2 s^2}{T} \tag{5.9.57}$$

图 5.9.5 是 $\lambda = 0.9$ 时的作用量–温度曲线

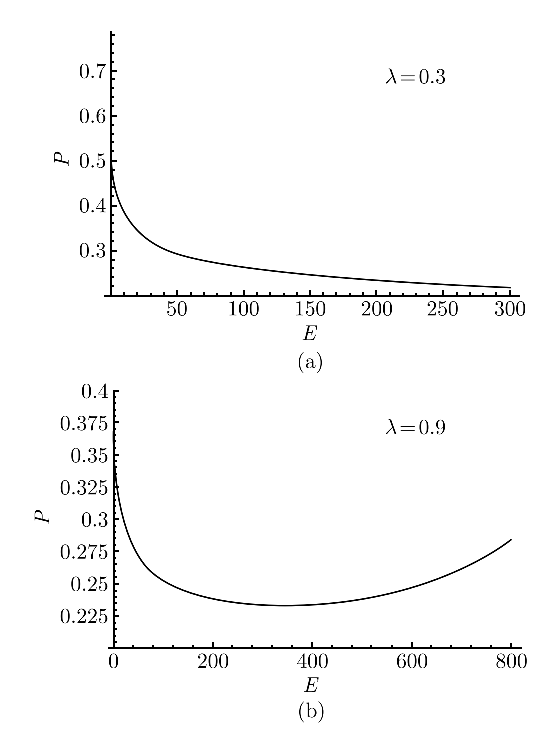


图 5.9.4 周期瞬子周期随能量的变化曲线

显然经典–量子过渡 (即从 $S_{\rm th}(T)$ 到 $S_c(T)$ 的过渡) 是一级相变。一个有趣的事实是，若把作用量和 van Der Waals 气体中的焓对应，把周期和能量关系图和 van Der Waals 气体状态方程中的压强–体积图对应，两者则十分相似。

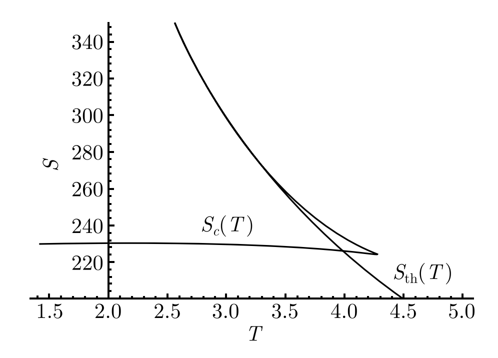


图 5.9.5 作用量–温度曲线, 一级相变

参 考 文 献

Chen G, Chen Z, Liang J Q. 2007. Quantum tunneling in the adiabatic dicke model. Phys. Rev. A, 76: 045801

Chen Z D, Liang J Q, Pu F C. 2002. Antiperiodic wave functions of Schrödinger cat states for nanomagnets and the realization of macroscopic Fermi-particles. Phys. lett. A, 300: 654~657

Chen Z D, Liang J Q, Pu F C. 2003. Tunnel splitting in biaxial spin models investigated with spincoherent- state path integrals. Phys. Rev. B, 67: 104420

Chen Z D, Liang J Q, Shen S Q. 2002. Suppression of quantum phase interference in the molecular magnet Fe8 with dipolar-dipolar interaction. Phys. Rev. B, 66: 092401

Feynman R P, Hibbs A R. 1965. Quantum mechanics and path integrals. McGraw-Hill

He M M, Xu C T, Liang J Q. 2006. Thermal and ground-state entanglement in the supermolecular dimer $[\mathrm{Mn4}]_2$. Phys. lett. A, 358, 381

Inomata A, Kuratsuji H, Gerry C C. 1992. Path integrals and coherent states of $SU(2)$ and $SU(1,1)$. World Scientific

Jin Y H, Nie Y H, Li Z J, Liang J Q. 2000. Quantum Phase Interference in magnetic molecular clusters. Mod. Phys. Lett. B, 14: 809

Jin Y H, Nie Y H, Liang J Q, et al. 2000. Tunnel splitting and quantum phase interference in biaxial ferrimagnetic particles at excited states. Phys. Rev. B, 62: 3316

Jin Y H, Nie Y H, Liang J Q. 2001. Macroscopic Quantum Coherence in magnetic molecular clusters. Chinese Phys. Lett., 18: 687

Kou S P, Liang J Q, Pu F C. 2001. Effective Landau theory for crossover from thermal hooping to quantum tunneling. J. Phys. Condens. Matter, 13: 2627

Kou S P, Liang J Q, Zhang Y B, et al. 1999. Crossover from thermal hopping to quantum tunneling in Mn12Ac,Crossover from thermal hopping to quantum tunneling in Mn12Ac. Phys. Rev. B, 59: 6309

Kou S P, Liang J Q, Zhang Y B, et al. 1999. Crossover from thermal hopping to quantum tunneling in ferromagnetic particle. Acta. Phys. Sin., 8(7): 485

Kou S P, Liang J Q, Zhang Y B, et al. 1999. Macroscopic quantum coherence in mesoscopic ferromagnetic systems. Phys. Rev. B, 59: 11792

Kou S P, Lu R, Liang J Q. 2002. An extended effective potential method with topological phase of spin tunnelling. Chinese Physics Letters, 19(10): 1525~1527

Li H, Shen S Q, Liang J Q, et al. 2005. Quantum dynamics of a vertex in a Josephson junction. Phys. Rev. B, 72: 014546

Liang J Q, Ding X X. 1987. Path integrals in multiply connected spaces and the fractional angular momentum quantization. Phys. Rev. A, 36: 4149

Liang J Q, Liu W M, Müller-Kirsten H J W, et al. 2004. Critical macroscopic quantum effects in quantum nucleation. Europhys. Lett., 68: 473

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Park D K, et al. 1998. Periodic Instantons and quantum-classical Transitions in Spin Systems, Phys. Rev. Lett., 81: 216

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Park D K, et al. 2000. Tunnel splitting in biaxial spin particles as a function of applied magnetic field Tunnel splitting in biaxial spin particles as a function of applied magnetic field. Phys. Rev. B, 61: 8856

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Park D K, et al. 2000. Nucleation at finite temperature beyond the superminispace model. Phys. Lett. B, 483: 225

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Rana J M S. 1997. Simple calculation of quantum spin tunneling effects. Phys. Lett. A, 231: 255

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Shurgaia A V, et al. 1998. Calculation of spin tunneling effects in the presence of an applied magnetic field Calculation of spin tunneling effects in the presence of an applied magnetic field. Phys. Lett. A, 237: 169

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Tchrakian D H. 1992. Solitons, bounces and sphalerons on a circle. Phys. Lett. B, 282: 105

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Zhang Y B, et al. 1999. Periodic bounce for the nucleation rate at finite temperature in minisuperspace models. Phys. Rev. D, 62: 025017

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Zhou J G, et al. 1997. Enhancement of quantum tunneling at excited states in Ferromagnetic particles. Phys. Lett. A, 228: 97

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Zhou J G, et al. 1997. Quantum tunneling of spin particles in periodic potential with asymmetric twin barriers. Phys. Lett. B, 393: 368

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Zhou J G. 1997. Quantum mechanical tunnneling at finite energy and its equivalent amplitudes in the (vacuum) instanton approximation. Z. Physik B, 102: 525

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1992. Bounces and the calculation of quantum tunneling effects. Phys. Rev. D, 45: 2963

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1992. Periodic instantons and quantum-mechanical tunneling at high energy. Phys. Rev. D, 45: 4685

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1992. Quantum tunneling for the sine-Gordon potential: Energy band structure and Bogomolny-Fateyev relation. Phys. Rev. D, 45: 4685

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1993. Bounces and the calculation of quantum tunneling effects. Phys. Rev. D, 49: 964 (E)

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1994. Nonvacuum bounces and quantum tunneling at finite energy. Phys. Rev. D, 50: 6519

Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1994. Quantum mechanical tunnneling at finite energy and its equivalent amplitudes in the (vacuum) instanton approximation. Phys. Lett. B, 332: 129

Liang J Q, Maharana L, Müller-Kirsten H J W. 1999. TheWess-Zumino term and quantum tunneling. Physica, B, 271: 28

Liang J Q, Morandi G. 1991. On the extended Feynman propagator for the harmonic oscillator. Phys. Lett. A, 160: 9

Liang J Q, Zhang Y B, Müller-Kirsten H J W, et al. 1998. Enhancement of quantum tunneling for excited states in ferromagnetic particles. J. Q. Liang, Phys. Rev. B, 57: 529

Liu W M, Fan W B, Zheng W M, Liang J Q, et al. 2002. Quantum tunneling of Bose-Einstein condensates in optical lattices under gravity. Phys. Rev. Lett., 88: 170408–1

Müller-Kirsten H J W. 2006. Introduction to quantum mechanics—Schrödinger equantion and path integral. World Scietific

Nie Y H, Jin Y H, Liang J Q, et al. 2000. Macroscopic quantum phase interference in antiferromagnetic particles. J. Phys. Condens. Matter, 12: L87

Nie Y H, Jin Y H, Liang J Q, et al. 2001. Quantum-classical transition of the escape rate in ferrimagnetic or antiferromagnetic particles with an applied magnetic field. Phys. Rew. B, 64: 134417

Nie Y H, Li Z J, Liang J Q, Wei Y Q. 2003. Bifurcation of a periodic instanton and quantum-classical transition in the biaxial nano-ferromagnet with a magnetic field along hard axis. Chin. Phys., 12(6): 905

Nie Y H, Liang J Q, Jin Y H, Pu F C. 2001. Effect of arbitrarily directed field on quantum phase interference in biaxial ferrimagnetic particles. Phys. Lett. A, 282: 215

Nie Y H, Liang J Q, Yan Q W. 2002. Crossover from quantum tunneling to classical hopping of barrier transition in nano-magnets. Phys. Lette. A, 299: 586

Nie Y H, Pu F C, Zhang Y B. Liang J Q, 1998. Temperature dependence of macroscopic quantum tunneling in antiferromagnetic particles. Phys. Lett. A, 248: 434

Nie Y H, Shi Y L, Zhang Y B, Liang J Q, et al. 2000. Macroscopic quantum effect in single domain antifferomagnetic particles in an external magnetic field. Acta Physica Sinica,

49(8): 1580

Nie Y H, Zhang Y B, Liang J Q, et al. 1999. Macroscopic quantum coherence in small antiferromagnetic particle and quantum interference effects. Physica, B, 270: 95

Nie Y H, Zhang Y B, Liang J Q, et al. 1999. Thermally assistend quantum tunneling in aniferromagnetic particles and macroscopic quantum effect. Acta Physica Sinica (in chinese), 48(5): 966

Reuter M. 2001 Classical and quantum dynamics—From classical paths to path integrals. Third edition. Spriger

Schulman L S. 1981. Techniques and applications of path integration. John Wiley and Sons

Xu C T, Chen G, He M M, Liang J Q, et al. 2007. Entanglement in the supermolecular dimer $[Mn4]_2$. Chinese Phys., 15(12): 2828

Yin W, Liang J Q, Yan Q W. 2006. The implementation of read-in and decoding a number based on Grover's algorithm in Mn4 SMM. Phys. Lett. A, 353: 205～209

Zhang G F, Liang J Q, Wei Y Q. 2003. Thermal Entanglement in Spin-Dimer with a strong magnetic field. Chin. Phys. Lett., 20: 452

Zhang Y B, Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, et al. 1999. Quantum-classical phase transition of escape rates in biaxial spin particles quantum-classical phase transition of escape rates in biaxial spin particles. Phys. Rev. B, 60: 12886

Zhang Y B, Nie Y H, Kou S P, Liang J Q, et al. 1998. Periodic instanton calculations of classical transitions in spin systems. Chinese Physics Letters, 15(9): 683～685

Zhang Y B, Nie Y H, Kuo S P, Liang J Q, et al. 1999. Periodic instanton and phse transition in quantum tunneling of spin system. Phys. Lett. A, 253: 345

Zhang Y B, Pu F C, Liang J Q. 1999. Path Integral method for tunneling of spin systems and the macroscopic quantum effect of magnetism. Commun. Theor. Phys., 31: 517

Zheng G P, Liang J Q, Liu W M. 2003 Instantons and solitons in a monolyer film of ferromagnetic grans with biaxial anisotropy. Ann. Phys., 308: 652

Zheng G P, Liang J Q, Liu W M. 2003. Periodic spin domains of spinor Bose-Einstein condensates in an optical lattice. Ann. Phys., 321: 950～957

Zheng G P, Liang J Q, Liu W M. 2009. Instantons in a ferromagnetic spin chain with biaxial anisotropy. Phys. Rev. B, 79: 014415

Zheng G P, Liang J Q, Nie Y H, et al. 2003. Periodic instantons and domain structure in a ferromagnetic film. Eur. Phys. J. B, 36: 215

Zhou B, Liang J Q, Pu F C. 2000. Bounces and the calculation of quantum tunneling effects for the asymmetric double-well potential. Phys. Lett. A, 271: 26

Zhou B, Liang J Q, Pu F C. 2000. Calculation of tunnel splitting in a biaxial spin particle withoult instanton technique. Phys. Lett. A, 278: 95

Zhou B, Liang J Q, Pu F C. 2000. Phase transition in quantum tunneling for a parametrized

double-well potential. Phys. Lett. A, 278: 243

Zhou B, Liang J Q, Pu F C. 2001. Crossover from quantum tunneling to classical hopping of domain walls in ferromagnets. Physica, B, 304: 141

Zhou B, Liang J Q, Pu F C. 2001. Phase transition in quantum tunneling for a parameterized double-well potential. Phys. Lett. A, 278: 243

Zhou B, Liang J Q, Pu F C. 2001. Quantum tunneling for the asymmetric double-well potential at finite energy. Phys. Lett. A, 281: 105

Zhou B, Liang J Q, Pu F C. 2001. Quantum-classical crossover of the escape rate of a biaxial spin system with an appled magnetic field. Physica, B, 301: 180

Zhou B, Liang J Q, Pu F C. 2001. Quantum-classical transition of the escape rate in ferrimagnetic or antiferromagnetic particles with an applied magnetic field. Phys. Rew. B, 64: 132407

Zhou B, Liang J Q. 2001. Quantum-classical phase transition of nucleation rate in a onedimensional uniaxial Heisenberg model with a magnetic field at an arbitrary direction. Int. J. Mod. Phys. B, 15: 3134

Zhou B, Shen S Q, Liang J Q, et al. 2002. Quantum computing of molecular magnet Mn12. Phys. Rev. A, 66: 010301

Zhou B, Shen S Q, Liang J Q. 2004. Calculation of tunnel splitting in a biaxial spin particle with an applied magnetic field. Eur. Phys. J. B, 40: 87

Zhou J G, Liang J Q, Burzlaff J, et al. 1996. Instanton induced tunneling amplitude at excited states with the LSZ method. Phys. Lett. A, 224: 142

Zhou J G, Zimmerschied F, Liang J Q, et al. 1996. BRST-invariant approach to quantum mechanical tunneling. Phys. Lett. B, 365: 163

第 6 章 超对称量子力学, 孤子 (瞬子) 稳定性和涨落方程

超对称在量子场论中提出的目的是试图统一描述基本相互作用，把对易和反对易关系统一到一个封闭代数内，Fermi 子和 Bose 子之间由一变换联系，称超对称场论。非破缺超对称导致 Fermi 子谱和 Bose 子谱的简并，所以需要自发对称破缺，Witten 提出量子力学超对称模型是为了理解和检验场论中的对称破缺，因为量子力学 “Toy” 模型不仅精确可解，且物理图像清晰。后来发现，这一理论框架在精确可解势模型的研究中十分有用，可解势形成超对称家族，可从已知的精确解构造出属同一超对称家族势的新解，可解模型的因式化方法可纳入超对称理论框架，因而被广泛应用于原子、分子物理和凝聚态。本章中，我们首先简要介绍超对称量子力学理论，然后讨论三种 1+1 维可解势的孤子 (瞬子) 解的稳定性和围绕经典组态 (classical configuration) 的涨落方程。它们形成一超对称家族，可能在除量子隧道效应的其他领域，特别是精确可解势的理论中有用。

6.1 超对称量子力学模型

考虑一个最简单的一维空间二分量矩阵 Hamilton 算符，即超对称量子力学模型

$$H=\frac{1}{2}[p^2+W^2(x)]-\frac{1}{2}\sigma_3 W'(x) \tag{6.1.1}$$

一维点粒子正则变量满足通常的对易关系，我们仍然选自然单位 $\hbar=1$，点粒子质量为单位 1。

$$[x,p]=\mathrm{i}$$

$W(x)$ 是 x 的实函数，称为超对称势。

$$\sigma_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{6.1.2}$$

引入一称为超荷的矩阵算符

$$Q=A(x,p)\gamma,\quad Q^\dagger=A^\dagger\gamma^\dagger \tag{6.1.3}$$

其中

$$A=\frac{1}{\sqrt{2}}(p-\mathrm{i}W),\quad A^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}(p+\mathrm{i}W) \tag{6.1.4}$$

是 Bose 算符，对易关系自然是

$$[A,A^\dagger]=W'(x) \tag{6.1.5}$$

当 $W=x$ 时，它退化到通常 Bose 子产生和湮灭算符的对易关系，而

$$\gamma=\sigma_-=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix},\quad \gamma^\dagger=\sigma_+=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix} \tag{6.1.6}$$

分别代表 Fermi 分量湮灭和产生算符，满足反对易关系

$$\{\gamma,\gamma^\dagger\}=1 \tag{6.1.7}$$

$$\{\gamma,\gamma\}=\{\gamma^\dagger,\gamma^\dagger\}=0 \tag{6.1.8}$$

容易验证超荷和 Hamilton 算符对易

$$[Q,H]=[Q^\dagger,H]=0 \tag{6.1.9}$$

其他对易关系是

$$\{Q,Q\}=\{Q^\dagger,Q^\dagger\}=0$$

Hamilton 算符可写为超荷的反对易子

$$H=\{Q^\dagger,Q\} \tag{6.1.10}$$

以上对易和反对易关系形成一封闭的 $sl(1,1)$ 超代数。

Hamilton 算符也可用 Bose 算符 A 和 $A^\dagger$ 的反对易和对易关系表示为

$$H=\frac{1}{2}\{A,A^\dagger\}-\frac{1}{2}\sigma_3[A,A^\dagger] \tag{6.1.11}$$

$$=\begin{pmatrix}A^\dagger A&0\\0&AA^\dagger\end{pmatrix} \tag{6.1.12}$$

$$=\begin{pmatrix}H_+&0\\0&H_-\end{pmatrix} \tag{6.1.13}$$

我们得到两分量一维势因式化的 Hamilton 算符

$$H_+=A^\dagger A=\frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dx^2}+V_+(x)\right)$$

$$H_- = AA^\dagger = \frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_-(x)\right)$$

两分量的势函数可由超对称势 W 统一描述为

$$V_\pm = W^2(x) \mp W'(x) \tag{6.1.14}$$

它们属于同一超对称家族，这一超对称量子力学模型的关键点在于，只要知道其中一个 Hamilton 算符的解，另一个可用 Bose 产生和湮灭算符 $(A^\dagger, A)$ 作用在已知解上生成。若超对称 Hamilton 算符有能量本征态，例如

$$H\Psi = E\Psi \tag{6.1.15}$$

旋量态定义为

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_{\rm u} \\ \psi_{\rm d} \end{pmatrix}$$

两分量 $\psi_{\rm u}$ 和 $\psi_{\rm d}$ 可分别表示 Fermi 和 Bose 场，由方程 (6.1.15) 容易证明两分量间有变换关系

$$\begin{aligned} \psi_{\rm u} &= \sqrt{E}A^\dagger\psi_{\rm d} \\ \psi_{\rm d} &= \sqrt{E}A\psi_{\rm u} \end{aligned} \tag{6.1.16}$$

定义旋量

$$\Psi_{\rm d} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{\rm d} \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\rm u} = \begin{pmatrix} \psi_{\rm u} \\ 0 \end{pmatrix}$$

则

$$Q\Psi_{\rm d} = 0, \quad Q^\dagger\Psi_{\rm u} = 0 \tag{6.1.17}$$

和

$$Q^\dagger\Psi_{\rm d} = \frac{1}{\sqrt{E}}\Psi_{\rm u} \quad Q\Psi_{\rm u} = \frac{1}{\sqrt{E}}\Psi_{\rm d} \tag{6.1.18}$$

如果把 $\Psi_{\rm d}$, $\Psi_{\rm u}$ 分别看作 Bose 和 Fermi 分量，则超荷算符可实现 Bose 和 Fermi 场分量间变换。

6.2 超对称破缺

Witten 引入超对称量子力学的目的是试图用一可解模型来实现和理解超对称破缺，而这在非微扰场论中是极其困难的。我们给出 Bose 和 Fermi 场分量间变换和对称破缺的一个具体例子，对给定的超势 W，Hamilton 算符 $H_\pm$ 本征方程有零能解

$$H_+\psi_0^{\rm u} = 0, \quad \psi_0^{\rm u}(x) = N{\rm e}^{-\int^x W(x'){\rm d}x'} \tag{6.2.1}$$

$$H_-\psi_0^{\mathrm{d}}=0,\quad \psi_0^{\mathrm{d}}(x)=N\mathrm{e}^{\int^x W(x')\mathrm{d}x'} \tag{6.2.2}$$

N 是规一化系数, 非对称破缺要求旋量波函数满足条件

$$Q\varPsi_0(x)=Q^\dagger\varPsi_0=0 \tag{6.2.3}$$

$$\varPsi_0=\begin{pmatrix}\psi_0^{\mathrm{u}}\\ \psi_0^{\mathrm{d}}\end{pmatrix}$$

零能解 ψ_0^{u} 和 ψ_0^{d} 只有一个是平方可积的，即可归一化，如果超势 W 在 x 趋于正或负无穷时的值分别为正或负，ψ_0^{u} 可规一，而 ψ_0^{d} 则不可能归一，加规一化条件的基态旋量波函数只能是

$$\varPsi_0=\begin{pmatrix}\psi_0^{\mathrm{u}}\\ 0\end{pmatrix} \tag{6.2.4}$$

$\psi_0^{\mathrm{d}}=0$，零能基态非简并，非对称破缺方程 (6.2.3) 成立。H_- 的基态只能从 H_+ 的第一激发态由超对称关系生成，如果 H_+ 的第一激发态是

$$H_+\psi_1^{\mathrm{u}}=E_1^{\mathrm{u}}\psi_1^{\mathrm{u}}$$

则 H_- 的基态

$$H_-\psi_0^{\mathrm{d}}=E_0^{d}\psi_0^{\mathrm{d}} \tag{6.2.5}$$

可由超对称关系得到

$$\psi_0^{\mathrm{d}}=\sqrt{E_1^{\mathrm{u}}}A\psi_1^{\mathrm{u}},\quad E_0^{\mathrm{d}}=E_1^{\mathrm{u}} \tag{6.2.6}$$

一般而言，H_- 的第 n 个激发态和 H_+ 的第 $n+1$ 个激发态对应。反之，若超势 W 在 x 趋于正或负无穷时的值分别为负或正，只有零能解 ψ_0^{d} 可归一，则非简并的基态旋量是

$$\varPsi_0=\begin{pmatrix}0\\ \psi_0^{\mathrm{d}}\end{pmatrix} \tag{6.2.7}$$

H_+ 的基态

$$H_+\psi_0^{\mathrm{u}}=E_0^{\mathrm{u}}\psi_0^{\mathrm{u}}$$

只能从 H_- 的第一激发态

$$H_-\psi_1^{\mathrm{d}}=E_1^{\mathrm{d}}\psi_1^{\mathrm{d}}$$

生成

$$\psi_0^{\mathrm{u}}=\sqrt{E_1^{\mathrm{d}}}A^\dagger\psi_1^{\mathrm{d}} \tag{6.2.8}$$

非对称破缺是零能基态的结果，若基态能量不为零，则产生对称破缺，这时 $H_\pm$ 的本征态一一对应，不存在非简并的零能基态。描述超对称破缺的 Witten 指数定义为

$$\Delta = \mathrm{Tr}(-1)^F \tag{6.2.9}$$

其中求迹运算要覆盖超 Hamilton 算符的所有分立和连续本征态。在超对称量子力学中 Fermi 子数算符是

$$F \equiv \frac{1}{2}(1-\sigma_3) \tag{6.2.10}$$

因为超对称旋量波函数是

$$\Psi_n(x) = \begin{bmatrix} \psi_n^{\mathrm{u}}(x) \\ \psi_n^{\mathrm{d}}(x) \end{bmatrix}$$

算符 $(-1)^F$ 在 Bose 分量 $\psi_n^{\mathrm{u}}(x)$ 和 Fermi 分量 $\psi_n^{\mathrm{d}}(x)$ 上的本征值分别为 ± 1，因而对称破缺的 Witten 指数是零

$$\Delta = 0$$

而非对称破缺的 Witten 指数是

$$\Delta = 1$$

图 6.2.1 是非超对称破缺能谱。

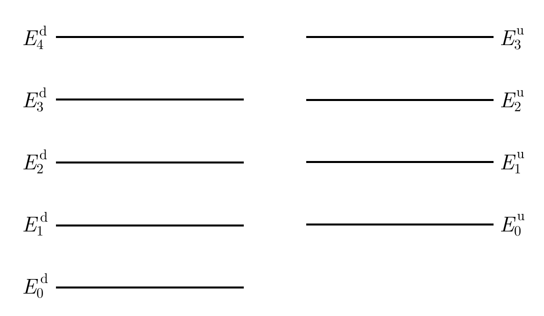


图 6.2.1 非超对称破缺能级示意图

6.3 围绕经典解的涨落方程和超对称

本书第 5 章论述了量子隧穿的瞬子方法，围绕瞬子解的量子涨落方程是 Schrödinger 方程，我们发现双势阱、反转双势阱和 sine-Gordon 势的量子涨落方程有超对称关系。

6.3.1 1+1 维经典场孤子 (瞬子) 解稳定性和量子涨落方程

点粒子 (空间零维) 在 1 维势场中运动的量子理论对应 $1+1$ 维经典场论，标量场变量用 $\phi(x,t)$ 表示，我们考虑静态场情况，静态场拉氏密度是

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\right)^2 + V(\phi) \tag{6.3.1}$$

零能经典解 ϕ_{c} 满足方程

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}x}\right)^2 - V(\phi_{\mathrm{c}}) = 0 \tag{6.3.2}$$

围绕经典解 ϕ_{c} 的涨落记为 ψ

$$\phi(x) = \phi_{\mathrm{c}}(x) + \psi(x) \tag{6.3.3}$$

按第 5 章中的路径积分定态相位微扰理论，作用量分为两部分

$$S = S(\phi_{\mathrm{c}}) + \delta S$$

$$S(\phi_{\mathrm{c}}) = \int \mathrm{d}x\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}x}\right)^2 + V(\phi_{\mathrm{c}})\right]$$

$$\delta S = \int \psi(x)M(\phi_{\mathrm{c}})\psi(x)\mathrm{d}x$$

二阶微扰算符是

$$M = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V''(\phi_{\mathrm{c}})\right] \tag{6.3.4}$$

其中

$$V''(\phi_{\mathrm{c}}) = \frac{\mathrm{d}^2 V}{\mathrm{d}\phi^2}|_{\phi=\phi_{\mathrm{c}}}$$

量子涨落算符的本征方程和本征态记为

$$M\psi_n = E_n\psi_n \tag{6.3.5}$$

其中，ψ_0 表示零模，本征值为零

$$E_0 = 0$$

6.3.2 孤子 (瞬子) 稳定性的物理解释和判据

孤子稳定性是一个复杂问题，这里给出孤子解 (瞬子则是相应的虚时解) 稳定性的一个简单的物理解释和判据，它完全由涨落方程的本征值确定。为此我们考虑偏离经典组态 (classical configuration) 的小含时扰动

$$\phi = \phi_{\mathrm{c}} + \chi(x,t) \tag{6.3.6}$$

把偏离经典解的小扰动按涨落方程本征函数 ψ_n 展开

$$\chi(x,t) = \sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}w_n t}\psi_n(x) \tag{6.3.7}$$

代入场方程

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\phi+V'(\phi)=0 \tag{6.3.8}$$

立即得到涨落方程本征值和小振动频率的关系

$$E_n=\omega_n^2 \tag{6.3.9}$$

显然，当涨落方程本征值大于零时，经典组态稳定；反之，若有负模存在，则小振动衰减，经典组态不稳定。对于瞬子来说，负模导致亚稳基态隧穿衰变。本章揭示一个十分有趣的事实，所有 1+1 维孤子，瞬子解的涨落方程构成一个量子力学超对称家族。

6.3.3 零模和超对称

定义量子涨落算符为超对称 Hamilton 的 Fermi 分量，即

$$H_-=M=\frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V''(\phi_c)\right]$$

M 是第 5 章中的量子涨落算符 (5.4.16)。

根据方程 (6.1.14) 相应的超对称势可用零模构造

$$W(x)=\frac{1}{\psi_0}\frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x}=\frac{\phi_c''(x)}{\phi_c'(x)} \tag{6.3.10}$$

$H_\mp$ 的零能解分别记为

$$H_-\psi_0^{\mathrm{d}}=0$$

$$H_+\psi_0^{\mathrm{u}}=0$$

则基态旋量

$$\Psi_0=\begin{pmatrix}\psi_0^{\mathrm{u}}\\ \psi_0^{\mathrm{d}}\end{pmatrix} \tag{6.3.11}$$

由运动方程 (6.3.2) 不难得到 Bose 分量 Hamilton 算符为

$$H_+=\frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{V'(\phi_c)}{V(\phi_c)}-V''(\phi_c)\right] \tag{6.3.12}$$

显然存在非破缺超对称

$$Q\Psi_0=Q^\dagger\Psi_0=0$$

因为超对称 Hamilton 算符的两个零能基态互为倒数关系

$$\psi_0^{\mathrm{u}}\propto\frac{1}{\psi_0^{\mathrm{d}}}$$

只有其中一个可归一或者平方可积。

作业 6.1 证明超对称势表达式方程 (6.3.10) 和 Bose 分量 Hamilton 算符 (6.3.12)。

我们给出三种隧穿势模型量子涨落算符的超对称势，为简洁起见，我们把第 5 章中 sine-Gordon 势、双势阱和反转双势阱的参数都取为单位 1，则有

$$V_1(\phi) = (1 + \cos\phi)$$

$$V_2(\phi) = \frac{1}{2}(\phi^2 - 1)^2$$

$$V_3(\phi) = \frac{1}{2}[1 - (\phi^2 - 1)^2] \tag{6.3.13}$$

基态 (零能) 瞬子解分别为

$$\phi_1 = 2\arcsin(\tanh x)$$

$$\phi_2 = \tanh x$$

$$\phi_3 = \sqrt{2}\,\mathrm{sech}(\sqrt{2}x)$$

三种势微扰算符 M 的零模、超对称势和 Hamilton 算符分别为

1) sine-Gordon 势

零模

$$\psi_0 = \phi_1' = 2\,\mathrm{sech}\,x$$

超对称势

$$W = -\tanh x$$

超对称 Hamilton 算符

$$H_+ = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + 1\right]$$

$$H_- = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + 1 - 2\mathrm{sech}^2 x\right] \tag{6.3.14}$$

Bose 分量的基态解

$$H_+\psi_0^{\mathrm{u}} = 0$$

显然是

$$\psi_0^{\mathrm{u}} \propto \cosh x \tag{6.3.15}$$

而

$$\psi_0^{\mathrm{d}} \propto \frac{1}{\cosh x} \tag{6.3.16}$$

只有 ψ_0^{d} 是平方可积的。

2) 双势阱势

零模

$$\psi_0 = \operatorname{sech}^2 x$$

超对称势

$$W(x) = -2\tanh x$$

超对称 Hamilton 算符

$$H_+ = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + 4 - 2\operatorname{sech}^2 x\right]$$

$$H_- = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + 4 - 6\operatorname{sech}^2 x\right] \tag{6.3.17}$$

只有基态 Fermi 子分量

$$\psi_0^{\mathrm{d}} \propto (\operatorname{sech} x)^2$$

平方可积。以上两种情况均有非破缺超对称，Witten 指数

$$\Delta = 1$$

3) 反转双势阱势

量子涨落算符

$$M = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\right] - 6\operatorname{sech}^2 z + 1] \quad z = \sqrt{2}x$$

有离散本征值

$$E = -\frac{3}{2}, 0$$

和连续谱

$$\frac{1}{4} + \rho, \quad \rho > 0$$

负模和零模本征函数分别是

$$\psi_{-\frac{3}{2}} = \operatorname{sech}^2 z$$

$$\psi_0 = 2\tanh z \operatorname{sech} z$$

零模不是最低能态，可以用负模构造超对称势

$$W = \frac{\psi'_{-\frac{3}{2}}}{\psi_{-\frac{3}{2}}} = -2\tanh z$$

相应的 Fermi 和 Bose 分量 Hamilton 算符则分别是

$$H_- = M + \frac{3}{2} = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 4 - 6\operatorname{sech}^2 z\right]$$

$$H_+ = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 4 - 2\operatorname{sech}^2 z\right] \tag{6.3.18}$$

6.3.4 周期解涨落方程的超对称势

前面我们讨论的是围绕基态孤子 (瞬子) 量子涨落方程的超对称，基态孤子的能量为零，如果能量为有限值

$$\frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}\phi_c}{\mathrm{d}x}\right]^2 - V(\phi_c) = -E_c \tag{6.3.19}$$

则得到空间的周期解 (对于瞬子而言，则是虚时周期解)

$$\phi_c(x) = \phi_c(x+T) \tag{6.3.20}$$

T 表示周期。下面我们讨论围绕周期解量子扰动方程的超对称

1) sine-Gordon 势

第 5 章给出了周期解

$$\phi_c = 2\arcsin[k\,\mathrm{sn}(x)]$$

其中

$$0 \leqslant k \leqslant 1$$

是 Jacobi 椭圆函数 $\mathrm{sn}(x)$ 的模，其周期为

$$T = 4n\mathcal{K}(k)$$

而 n 是大于零的正数，$\mathcal{K}(k)$ 表示第一类完全椭圆积分。周期孤子能量是

$$E_c = 4(1-k^2)$$

量子涨落方程

$$M\psi = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 2k^2\overset{2}{\mathrm{sn}}(z) - 1\right]\psi = E\psi \tag{6.3.21}$$

是一个 Lame 方程，$z=\sqrt{2}x$。

其分立本征函数和本征值分别是

$$\mathrm{dn}(z), \mathrm{cn}(z), \mathrm{sn}(z)$$

$$E = \frac{k^2-1}{2}, 0, \frac{k^2}{2}$$

零模不是基态，和反转双势阱一样，用负模构造超势和超对称 Hamilton 算符

$$W = \frac{(\mathrm{dn}(z))'}{\mathrm{dn}(z)} = -k^2\frac{\mathrm{sn}(z)\,\mathrm{cn}(z)}{\mathrm{dn}(z)}$$

$$W' = k^2\frac{\mathrm{dn}^2(z)\,\mathrm{sn}^2(z) - \mathrm{cn}^2(z)}{\mathrm{dn}^2(z)}$$

Bose 和 Fermi 分量 Hamilton 算符分别是

$$H_- = M - \frac{k^2-1}{2} = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 2k^2\,\overset{2}{\mathrm{sn}}(z) - k^2\right] \tag{6.3.22}$$

$$H_+ = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 2k^2\frac{\mathrm{cn}^2(z)}{\mathrm{dn}^2(z)} - k^2\right] \tag{6.3.23}$$

2) 双势阱势

周期解

$$\phi_c(z) = kb(k)\mathrm{sn}(z)$$

是新变量

$$z = b(k)x$$

的函数。Jacobi 椭圆函数 $\mathrm{sn}(x)$ 的模是 k，而参数

$$b(k) = \left[\frac{2}{1+k^2}\right]^{\frac{1}{2}}$$

是 k 的函数。量子涨落算符求得为

$$M = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \left(6k^2\mathrm{sn}^2(z) - \frac{2}{b^2(k)}\right)\right] \tag{6.3.24}$$

其分立本征函数和本征值分别是，

$$\mathrm{sn}(z)\mathrm{cn}(z), \mathrm{sn}(z)\mathrm{dn}(z), \mathrm{cn}(z)\mathrm{dn}(z)$$

$$\mathrm{sn}^2(z) - \frac{1}{3k^2}[1 + k^2 \mp \sqrt{1-k^2(1-k^2)}] \tag{6.3.25}$$

和

$$E = \frac{3}{b^2(k)(1+k^2)}, \frac{3k^2}{b^2(k)(1+k^2)}$$

$$0, \frac{1}{b^2(k)}\left[1 \pm 2\frac{\sqrt{1-k^2(1-k^2)}}{1+k^2}\right] \tag{6.3.26}$$

最后一个是负模，用它构造的超势为

$$W = \frac{2\mathrm{sn}(z)\mathrm{cn}(z)\mathrm{dn}(z)}{\mathrm{sn}^2(z) - \eta(k)}$$

其中

$$\eta(k) = \frac{1}{3k^2}[1 + k^2 + \sqrt{1-k^2(1-k^2)}]$$

超势的一阶导数是

$$W' = \frac{2[\mathrm{cn}^2(z)\mathrm{dn}^2(z) - \mathrm{sn}^2(z)\mathrm{dn}^2(z) - k^2\mathrm{sn}^2(z)\mathrm{cn}^2(z)]}{\mathrm{sn}^2(z) - \eta(z)} - \frac{4\mathrm{sn}^2(z)\mathrm{cn}^2(z)\mathrm{dn}^2(z)}{(\mathrm{sn}^2(z) - \eta(k))^2}$$

Fermi 和 Bose 分量 Hamilton 算符分别为

$$H_- = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} - 6k^2\mathrm{sn}^2(z) + 2[1 + k^2 - \sqrt{1 - k^2(1 - k^2)}]\right] \tag{6.3.27}$$

$$H_+ = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 6k^2\mathrm{sn}^2(z) - 2[1 + k^2 - \sqrt{1 - k^2(1 - k^2)}]\right] + \frac{8\mathrm{sn}^2(z)\mathrm{cn}^2(z)\mathrm{dn}^2(z)}{(\mathrm{sn}^2(z) - \eta(z))^2} \tag{6.3.28}$$

3) 反转双势阱势

周期 bounce 解

$$\phi_c(z) = \beta(k)\mathrm{dn}(z)$$

中的 Jacobi 椭圆函数宗量是

$$z = \beta(k)x$$

Jacobi 椭圆函数 $\mathrm{sn}(x)$ 的模 γ 定义为

$$\gamma^2 = \frac{4k}{(1+k^2)^2}$$

参数

$$\beta(k) = \frac{1+k}{\sqrt{1+k^2}}$$

是 k 的函数，量子涨落算符求得为

$$M = \frac{1}{2}\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + 6\gamma^2\mathrm{sn}^2(z) + \frac{2}{\beta^2(k)} - 6\right]$$

其分离本征函数和双势阱势的形式一样，但须把 Jacobi 椭圆函数的模由 k 换成 γ，相应的本征值是

$$E = 0, \quad -\frac{3}{2}\frac{(1-k^2)^2}{\beta^2(k)(1+k^2)}, \quad -\frac{3}{2}\frac{(1+k^2)^2}{\beta^2(k)(1+k^2)}$$

$$-1 \pm 1\frac{\sqrt{1+14k^2+k^2}}{\beta^2(k)(1+k^2)}$$

除零模外全为负模，用最低能量本征态 (双势阱势量子涨落算符的负模) 构造的超对称算符和双势阱势的形式相同，当然要把模 k 换为 γ。

我们用超对称量子力学方法得到一个庞大的一维精确可解周期势家族，它们可能有实际的技术应用.

参 考 文 献

Byrd P F, Friedman M D. 1971. Handbook of Elliptic Integrals for Engineers and Scientists. 2nd ed. Springer, New York

Chen G, Liang J Q. 2009. Peculiar quantum phase transitions amd hidden supersymmetry in a Lipkin-Meshkov-Glick model. Commun. Theor. Phys., 51: 881

Cooper F, Khare A, Sukhatme U. 2001. Supersymmetry in quantum mechanics. World Scientific

Cooper F, Khare A, Sukhatme U. 1995. Supersymmetry and quantum mechanics. Phys. Rep., 251: 267

Kulshreshtha D S, Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. 1993. Fluctuation equations about classical field configurations and supersymmetric quantum mechanics. Ann. Phys., 255: 191

Müller-Kirsten H J W, Wiedemann A. 1987. Supersymmetry: an introduction with conceptual and calculational details. World Scientific

Müller-Kirsten H J W. 2006. Introduction to quantum Mechanics—Schrödinger equantion and path integral. World Scietific

Witten E. 1981. Dynamical breaking of supersymmetry. Nucl. Phys. B, 185: 513

Witten E. 1982. Constraints on supersymmetry breaking. Nucl. Phys. B, 202: 253

第 7 章　量子算法的少比特数模拟及量子计算的绝热操纵实现方案

除了量子计算的一般性背景介绍外，本章内容主要取材于我们的两篇论文，即 PRA **71**, 022317(2005) 及 PRL **100**, 113601(2008)。在前一工作中，考虑到实际存在着的相干错误，我们在少比特数水平上模拟了著名的 Shor 量子算法；而在后一项工作中，我们提出了绝热逻辑门量子计算方案，它兼具标准绝热量子计算方案中对操作时间不敏感性的优点和通常逻辑门量子计算方案中普适性的优点。

7.1　量子计算概述

本节首先回顾量子计算的发展历史、主要背景及其所涉及的一些基本概念。

7.1.1　经典计算的原理性限制

由经典物理理论支配着的电子通信和电子计算机技术，现在 (并且在可预期的未来相当长时间内仍将) 是人们传送和处理信息的主要途径和工具。然而，这一局面正面临着以量子物理为理论基础的量子信息技术的越来越严峻的挑战。

量子计算是量子信息科学中最重要的研究领域之一。最早，Feynman 首先认识到，经典的电子计算机将不可能有效地对量子系统的动力学行为进行模拟。的确，作为经典图灵机具体实现形式的电子计算机，其运算速度的进一步提高将受到如下三种原理上的限制：

(1) 计算速度不断提高的追求，需要不断提高作为电子计算机硬件基础的微电子元器件的集成度。但是，电子元器件的小型化必然受到量子极限尺寸的限制。实际上，在纳米量级上量子效应将很显著，因而受经典物理规律支配的微电子元器件的小型化努力几乎走到了尽头。

(2) 电子计算机的每一步操作都是不可逆的，而根据热力学原理这样的过程是一定要消耗热量的，因而计算芯片的发热问题是提高电子计算机计算能力所无法逾越的障碍。

(3) 本质上说，电子计算机的计算是串行的而不具有内在的并行性。因此，通过连接更多的计算资源来解决大规模并行计算需要的复杂性极大而难以实现。比如，要模拟一个由四十个自旋 1/2 粒子组成的量子系统的演化过程，要求电子计算

机至少要有 $2^{40} \approx 10^6$M 的内存，并且可有效地计算一个 $2^{40} \times 2^{40}$ 维矩阵的指数。这对电子计算机来说，显然是不可能完成的任务。原则上，这一问题的解决只能由未来的量子计算机来完成。

对由量子力学基本原理所支配的计算机来说，原则上以上制约着电子计算机计算能力提高的原理限制都将不再存在。这是因为，构成量子计算机“芯片”的核心元器件实际上就是一些量子器件；并且量子计算正是由一系列可逆的幺正演化完成的，因而理论上说在计算过程中并不消耗能量，所以不存在发热问题；更重要的是，量子计算是建立在量子态叠加原理基础上的，故而自动地具有并行性。

7.1.2　量子计算的并行性

第一个显示量子计算并行性的算法是 Deutsch-Jozsa 算法。假定布尔函数 $f(x)$ 的取值整体上只有两种可能：① 对所有的输入，输出恒等于“0”或“1”，即该函数是常数型的；② 对所有的输入，其输出一半等于“0”，另一半等于“1”，即此函数是平衡型的。现在的问题是，如何确定该函数是属于这两种类型中的哪一种。显然，对这个问题的回答，经典计算只能是依次计算各种不同输入的输出值，然后将所有的输出结果综合起来给出结论。所以，如果输入的自变量有 N 个，那么需要计算的次数就是 $O(N)$。但对量子计算机而言，只需要运行 Deutsch-Jozsa 算法一次便能得到问题的答案。为简便起见，我们以最简单的两比特系统为例来具体看看这一算法是如何完成的。

对两比特系统而言，输入的数字信号只有四个，即 $x = 00, 01, 10, 11$。经典计算要给出 $f(x)$ 是常数型的还是平衡型的，需要对每个输入信号依次计算 $f(x)$，这样共需要四次才能得出结论。但 Deutsch-Jozsa 量子算法对这一问题的求解则采取了一种完全不同的解法，它主要包括如下的几个步骤：

(1) 将两比特存储器制备为各种可能输入数态的等概率叠加态, 同时引入一个制备于叠加态的单比特辅助存储器。初始时刻两比特都自然地处于它们的量子基态 $|00\rangle = |X_0\rangle$。对每个比特施行所谓的 Hadamard 变换

$$\hat{U}_{\mathrm{H}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.1.1}$$

可得

$$|X_1\rangle = \prod_{j=1}^{2} \hat{U}_{j,\mathrm{H}} |X_0\rangle = \frac{1}{2} \left(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle\right) \tag{7.1.2}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{x=00,01,10,11} |x\rangle \tag{7.1.3}$$

同时，单比特辅助存储器被制备于如下的叠加量子态：

$$|Y\rangle = \hat{U}_{\alpha,\mathrm{H}}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{y=0,1}(-1)^y|y\rangle \tag{7.1.4}$$

(2) 对两个存储器施行一个联合量子操作，即受控 f- 操作 $\hat{U}_f$，得到

$$\hat{U}_f|X_1\rangle|Y\rangle = |X_1\rangle|Y\oplus f(x)\rangle = (-1)^{f(x)}|X_1\rangle|Y\rangle = |X_1'\rangle|Y\rangle \tag{7.1.5}$$

$$= \frac{1}{2}\left[(-1)^{f(00)}|00\rangle + (-1)^{f(01)}|01\rangle + (-1)^{f(10)}|10\rangle + (-1)^{f(11)}|11\rangle\right]\otimes|Y\rangle \tag{7.1.6}$$

(3) 再次对存储器的每个比特施行一次 Hadamard 操作，得

$$|X_2\rangle = \prod_{j=1}^{2}\hat{U}_{j,\mathrm{H}}|X_1'\rangle \tag{7.1.7}$$

$$= \frac{1}{2}\left(A|00\rangle + B|01\rangle + C|10\rangle + D|11\rangle\right) \tag{7.1.8}$$

其中

$$A = (-1)^{f(00)} + (-1)^{f(01)} + (-1)^{f(10)} + (-1)^{f(11)}$$

$$B = (-1)^{f(00)} - (-1)^{f(01)} + (-1)^{f(10)} - (-1)^{f(11)}$$

$$C = (-1)^{f(00)} + (-1)^{f(01)} - (-1)^{f(10)} - (-1)^{f(11)}$$

$$D = (-1)^{f(00)} - (-1)^{f(01)} - (-1)^{f(10)} + (-1)^{f(11)}$$

最后，为了“读出”函数 $f(x)$ 的整体特性我们对存储器进行投影测量 $P = |00\rangle\langle 00|$，得到结果：$P_{|00\rangle} = |A|^2/4$。显然，如果 $f(x)$ 是常数型的，则 $P_{|00\rangle} = 1$；反之，如果 $f(x)$ 是平衡型的，则 $P_{|00\rangle} = 0$。通过这个例子我们看到，量子计算的效率比经典计算高的一个根本原因是，不同输入情况下函数 $f(x)$ 的取值被并行地进行了计算，其整体特性进而再通过量子干涉效应归结为计算末态中某个计算基的取值概率。

以上所举的简单例子，充分展示了建立在量子力学态叠加原理基础上的量子计算所具有的自动并行性。这一特性是所有量子算法构造的基础。

7.1.3 量子计算的主要步骤

一般而言，一个量子计算的过程大致分为以下三步：

(1) 制备：要求将“芯片”中的各个比特制备在某个特定的量子初态上，通常是其基态。当然，还要求这些比特在计算过程中必须保持有良好的量子相干性，从而保证量子态叠加原理能够一直成立。

(2) 计算：施行完成预想计算功能的各种可逆幺正演化，这些演化就是计算过程中的各种“操作”。类比于经典计算，人们相信量子计算也可以由一些基本的量

子逻辑运算组成。确实，已经证明任意的两比特操作加上单比特的任意旋转就可以构成一个通用基本逻辑门集：任何量子计算都可以由它们的某种组合来完成。

(3) 读取：对量子存储器进行量子测量，读出计算结果。要指出的是，大多数的量子计算末态仍然是计算基的某种量子叠加态，所以投影到某个计算基上的测量所输出的结果一般都是概率性的。所以，量子计算通常需要重复多次才能得到最后比较明确的结果。

运行一个量子算法的量子计算过程，可以一般性地用所谓的“量子电路”表示，它由设计好的一系列幺正演化过程组成。例如，施行上节所提及的两比特 Deutsch-Jozsa 算法的量子计算过程所采用的正是下面的“量子电路” (图 7.1.1)。

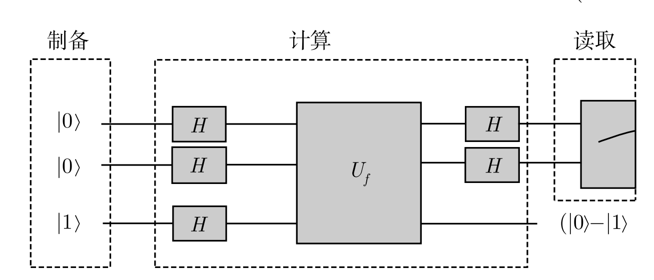


图 7.1.1　运行两比特 Deutsch-Jozsa 算法的“量子电路”图

7.2　Shor 量子算法及其少比特数情况下的模拟

正是 Shor 量子算法的提出，才使量子计算不再仅仅停留在理论上的兴趣，而且具有了现实意义：这一算法能对现行信息安全所依仗的大数因子分解难题进行有效的破解。由此，真正激起了人们对量子信息科学的关注。

本节将在回顾这一著名量子算法基本思想的基础上，对其少比特数情况下的运行进行数值模拟。我们的工作证明，尽管计算系统的量子相干性能够很好地保持，但与各操作 (幺正演化) 之间弛豫有关的相干错误仍对算法的运行产生重要影响。

7.2.1　Shor 量子算法的基本思想

在 Shor 算法提出以前，人们一直相信尚没有一种有效的算法能对当今广泛应用着的公钥密码体系的安全性构成威胁，因为这一体系的安全性依赖于这样的一个命题，即大数因子分解是一个难解的问题。

比如，在我们熟悉的 RSA 公钥密码体系中，密钥的生成方法是：首先，找到两个大质数 p, q (它们都是 100~200 位十进制的数字)，计算 $N = p \cdot q$ 的值及 Eular 函数 $\phi(N) = (p-1)\cdot(q-1)$; 其次，在 $1 \leqslant e < \phi(N)$ 范围内随机选择一个与 $\phi(N)$

互质的整数，计算模 $\phi(N)$ 下 e 的逆元 $d = e^{-1}\mathrm{mod}\phi(N)$; 最后，定义公钥是 (N, e), 私钥是 d (或 p, q)。可见，这一密码框架的安全性在理论上完全取决于大整数 n 的质因数分解的困难性。因为要从公钥 (N, e) 中想得到密钥 d 必须先要得到 (p, q)。事实上，大数因子分解的算法研究一直是数论和密码分析理论研究的一个重要课题，但一直没有找到能在经典电子计算机上可以运行的有效算法。一般认为，实现这一分解的主要步骤是：

(1) 随机选择一个与 N 互素的整数 y, $1 < y < N$;

(2) 计算模指数函数 $f_N(a) = y^a\,\mathrm{mod}N$, $a = 0, 1, 2, \cdots$ 的最小周期 r;

(3) 计算 $Z = \sqrt{y^r}$, 再用辗转相除法求 $Z \pm 1$ 与 N 的最大公约数，它们就是大数 N 的两个质因数。

显然，在这一分解方法中，周期 T 的求得是最为关键的。目前已知的经典算法之所以不是有效的，原因就是这些算法求解周期 T 的复杂性都是呈指数率增长的。而对 Shor 量子算法而言，这一解法却可以有效地进行，因为其计算的复杂性只是多项式地增加的。物理上，Shor 量子算法之所以对大数因子分解是有效的，是基于下面的两点：① 利用量子态叠加原理所赋予的量子并行性，可以同时计算各个 a 值所对应的模指数函数 $f_N(a)$ 的取值；② 引入量子 Fourier 变换，使得周期 T 所对应的解的输出概率能够通过量子干涉而得以增加 (即在最后的量子测量中非解的输出概率显著变小)。最后一点是 Shor 最富创意的贡献，它是此算法有效性的根本保证。事实上，对涉及 m 个比特的大数因子分解问题，量子 Fourier 变换总共只需 $m(m+1)/2 \sim O(m^2)$ 个基本量子逻辑门操作。所以，对大数因子分解问题 Shor 算法是一种有效的算法：其复杂度随着问题的规模只是多项式地增加。

现在，实验上已经实现了最多涉及七个比特的 Shor 算法，其更大规模实现的实验研究正在进行当中。

7.2.2 Shor 量子算法的少比特数模拟：相干错误的纠正

在一个理想的量子计算过程中，所有涉及的操作都假定是精确进行的。但实际上任何一个计算过程的物理实现都不可避免地受到各种噪声和操作不完全精确的影响。大体上来讲，计算错误可以分为两种不同类型：非相干和相干的错误。非相干错误主要来自于计算系统与外部环境的随机耦合，而相干错误通常来源于幺正演化过程中演化时间设置的不精确性。很多工作已经讨论了非相干错误的消除和避免办法，这里我们主要关注相干错误。通常情况下，两个量子比特的能级具有不同的能量，在连续两次操作的有限时间间隔内，量子存储器的叠加波函数进行快速的相干振荡。这些振荡如果不能得到有效抑制的话，将影响量子算法的正确运行。理论上，通过调整量子比特能量劈裂到零，或者用两个物理量子比特编码一个逻辑量子比特使这两个逻辑态有相同的能量，或者通过在计算过程中引入一个的“自

然”位相等都可以避免这些相干动力学位相错误。但在实际的操作中，这些方法并不一定是完全有效或者是最经济的。为简便起见，我们将这种错误完全归结于两个相继幺正操作之间 (即操作弛豫) 量子比特的内在动力学演化。

标准的 Shor 算法需要用两个量子存储器来实现：一个是具有 L 个量子比特的工作存储器 W，其任务是用于寻找最小周期 T; 另一个是由 L' 个量子比特组成的辅助存储器 A, 用于存储函数计算中所得到的函数 $f(x)$。这里，$N^2 < Q = 2^L < 2N^2$ 和 $2^{L'-1} < N < 2^{L'}$, Q 是该工作存储器中 Hilbert 空间的维数。我们运行 Shor 量子算法计算过程的简化操作步骤可由图 7.2.1 给出示意：

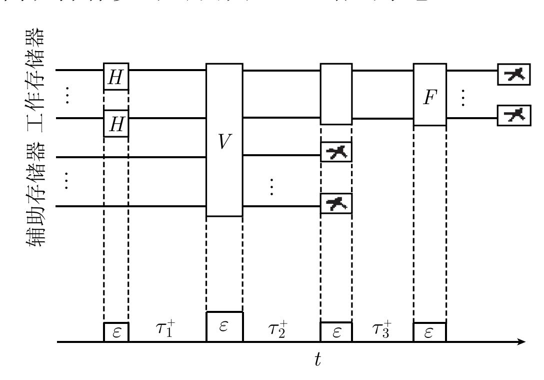


图 7.2.1　实施 Shor 算法的简化量子电路

其中 $\tau_j^+(j=1,2,3)$ 是在连续操作之间的时间延迟。这里，H 表示的是 Hadamard 门，而 F 表示的是量子 Fourier 变换

(1) 将工作存储器初始化为其计算基矢的等概率叠加态，而辅助存储器则初始化为其逻辑基态 $|0\rangle$。最初，每个工作量子比特都是处在其逻辑的基态 $|0\rangle$ 上的，经过一个 Hadamard 门操作后我们就得到这一系统的计算初态

$$|\varPsi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{Q}}\sum_{j=0}^{Q-1}|j\rangle_W \otimes |0\rangle_A \tag{7.2.1}$$

在有限的时间延迟 τ_1 之后，在第二次幺正变换之前，整个系统的初态 $|\varPsi(0)\rangle$ 变为

$$|\varPsi(\tau_1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{Q}}\sum_{j=0}^{Q-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_j\tau_1}|j\rangle_W \otimes \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0\tau_1}|0\rangle_A \tag{7.2.2}$$

这里，E_j 是态 $|j\rangle$ 的能量且 $\hbar=1$。以下，τ_m $(m=1,2,3,\cdots)$ 表示在第 $m-1$ 次和第 m 次幺正变换之间的时间间隔；$\epsilon(\ll \tau_m)$ 是第 m 次幺正变换的作用时间，这里假定它与其他时间尺度相比是非常小的故而所对应的动力学位相可以忽略。

(2) 计算 $f_{N,a}(j) = a^j \,\mathrm{mod} N$ 并存储于存储器 A 中，然后通过一个联合操作 $\hat{V}$ 将工作存储器与辅助记存器纠缠起来。在一个有限时间延迟 τ_2 之后，在下一步之前 (即第三次幺正变换)，整个系统变为如下的纠缠态：

$$|\Psi(\tau_1^+ + \tau_2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{q}}\sum_{s=0}^{r-1}|\psi\rangle_W \otimes |\phi\rangle_A \tag{7.2.3}$$

其中

$$|\phi\rangle_A = \exp[-\mathrm{i}E_{f_{a,N}(s)}\tau_2]|f_{a,N}(s)\rangle_A$$

和

$$|\psi\rangle_W = \sum_{l=0}^{w}\exp[-\mathrm{i}E_{lr+s}(\tau_1^+ + \tau_2)]|lr+s\rangle_W$$

这里，$w = [(q-s-1)/r]$ 是小于 $(q-s-1)/r$ 的最大整数。

(3) 在计算基 $|j\rangle_A$ 中对辅助存储器 $|\phi\rangle_A$ 进行投影测量。在这个操作之后，整个系统的态变为 $|\Psi(\tau_1^+ + \tau_2^+)\rangle = |\psi(\tau_1^+ + \tau_2^+)\rangle_W \otimes |\phi(\tau_1^+ + \tau_2^+)\rangle_A$。也就是说，这时两个存储器已经退纠缠，并且工作存储器将塌缩为某个周期内几个数态的叠加。比如，如果在测量辅助存储器时得到的值为 $A_s = a^s \mathrm{mod} N$，那么工作存储器将立刻变为

$$|\psi(\tau_1^+ + \tau_2^+)\rangle_W = \frac{1}{\sqrt{w+1}}\sum_{l=0}^{w}\exp[-\mathrm{i}E_{lr+s}(\tau_1^+ + \tau_2^+)]|lr+s\rangle_W \tag{7.2.4}$$

经历了第三段时间延迟 τ_3 后，工作存储器演化为

$$|\psi(\tau_1^+ + \tau_2^+ + \tau_3)\rangle_W = \frac{1}{\sqrt{w+1}}\sum_{l=0}^{w}\exp[-\mathrm{i}E_{lr+s}(\tau_1^+ + \tau_2^+ + \tau_3)] \times |lr+s\rangle_W \tag{7.2.5}$$

(4) 对工作存储器施行第四次幺正变换，即量子 Fourier 变换 (F 变换) 以便提取 r 的信息，即使 $a^r \mathrm{mod} N = 1$ 成立的最小整数。在此变换后，工作存储器的状态变为

$$|\psi(\tau)\rangle_W = \frac{1}{\sqrt{Q}}\sum_{k=0}^{Q-1}g(k)|k\rangle_W \tag{7.2.6}$$

其中, $\tau = \tau_1^+ + \tau_2^+ + \tau_3^+$, 并且

$$g(k) = \frac{\exp(2\pi\mathrm{i}sk/Q)}{\sqrt{w+1}}\sum_{l=0}^{w}\exp[-\mathrm{i}E_{lr+s}\tau_3 + 2\pi\mathrm{i}lkr/Q] \tag{7.2.7}$$

在另一个延迟时间 τ_4 (即应用第四次幺正变换之前) 后，工作存储器的状态变为

$$|\psi(\tau+\tau_4)\rangle_W = \frac{1}{\sqrt{Q}}\sum_{k=0}^{Q-1}g(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_k\tau_4}|k\rangle_W \tag{7.2.8}$$

(5) 最后，我们在计算基 $|j\rangle_W$ 上对工作存储器进行投影测量，得到数态 $|k\rangle$ 的几率是

$$P(k)=\frac{1}{Q(w+1)}\left|\sum_{l=0}^{w}\exp[-\mathrm{i}E_{(lr+s)}\tau+2\pi\mathrm{i}lkr/Q]\right|^2 \tag{7.2.9}$$

注意这里的 $P(k)$ 只依赖于总有效的延迟时间 $\tau=\tau_1^++\tau_2^++\tau_3^+$。

显然，如果没有任何操作延迟 $\tau_m\equiv 0$ 则式 (7.1.5) 中的几率分布 $P(k)$ 就会过渡到理想 Shor 量子算法所得到的结果。这里的结果清楚地表明，由于叠加波函数中的动力学位相所导致的相干错误的干扰，可预期的概率分布已被明显地修改，这将导致在最后的输出中得到预期结果的概率变低。

实际上，以上的动力学位相相干错误可以通过设定特定的位相匹配条件来消除。不失一般性，我们假定所有的量子比特具有相同的能谱，因而具有相同数量的激发比特的不同量子态将获得相同的动力学位相。例如，在延迟时间 t 之间，四比特态 $|1_30_20_10_0\rangle$ 和 $|0_30_20_11_0\rangle$ 将获得相同的动力学位相 $\exp(-\mathrm{i}3\epsilon_0t-\mathrm{i}\epsilon_1t)$。这里 ϵ_0 和 ϵ_1 分别是一个比特处在基态 $|0\rangle$ 和激发态 $|1\rangle$ 的能量。在这种近似下，式 (7.1.5) 可写为

$$P(k)=\frac{1}{Q(w+1)}\left|\sum_{l=0}^{w}\exp[2\pi\mathrm{i}lk\frac{r}{Q}]\exp[-\mathrm{i}m_l\tau\Delta]\right|^2 \tag{7.2.10}$$

其中, $\Delta=\epsilon_1-\epsilon_0$ 是比特的能级劈裂，m_l 是量子比特数。很明显，当整个有效延迟时间 $\tau(\tau=\tau_1^++\tau_2^++\tau_3^+)$ 满足如下的位相匹配条件：

$$\tau\Delta=(\epsilon_1-\epsilon_0)\tau=2n\pi,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{7.2.11}$$

时，上述的概率分布 $P(k)$ 又将回复到理想计算所得到的结果。

上面的一般性讨论，可以通过一个很简单的实例来具体说明。比如，要对最小的复合数 4 进行因数分解，我们需要一个两量子比特的工作存储器和一个两比特的辅助存储器。取 $a=3$，则经过以上所论的四个简化步骤后，工作存储器的量子态为

$$\begin{aligned}|\psi(\tau+\tau_4)\rangle_W&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle_W+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tau_4\Delta}|1_1\rangle_W)\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(\zeta|0_0\rangle_W+\xi\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tau_4\Delta}|1_0\rangle_W)\right\}\\&=\frac{1}{\sqrt{8}}\left[\zeta|0\rangle_W+\xi|1\rangle_W+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tau_4\Delta}\zeta|2\rangle_W+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tau_4\Delta}\xi|3\rangle_W\right],\end{aligned} \tag{7.2.12}$$

其中，$\zeta=1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tau\Delta}$、$\xi=1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tau\Delta}$。这里，$|\alpha_k\rangle_W$ 指的是在工作记存器中第 k 个比特 $k=0,1$ 的逻辑态 $(\alpha=0,1)$。另外，$|0\rangle_W=|0_10_0\rangle_W$，$|1\rangle_W=|0_11_0\rangle$，$|2\rangle_W=|1_10_0\rangle$，$|3\rangle_W=|1_11_0\rangle_W$。可见，如果将辅助存储器进行投影 $\hat{P}_A=|1\rangle_A\langle 1|_A$，则工作存储器将塌缩到要么 $|0\rangle_W$ 态，要么 $|2\rangle_W$ 态，相应的概率均为 $p_{\mathrm{e}}=|\zeta|^2=$

$[1+\cos(\tau\Delta)]/4$。可见，只要满足相位匹配的条件 (7.1.7)，预期的测量结果将为 $p_{\rm e}=1/2$。

对于稍微复杂些的分解，比如我们用 9 个工作比特对 $N=21$ 做因式分解，可取 $a=5$。数值模拟得出的图 7.2.2 显示了对应不同的延迟时间 $\Delta\tau=0,0.4\pi,\pi,1.6\pi,2\pi$ 情况下，各种可能输出的概率分布。显然，当满足相位匹配条件时，结果与理想计算情况下输出的结果相同。

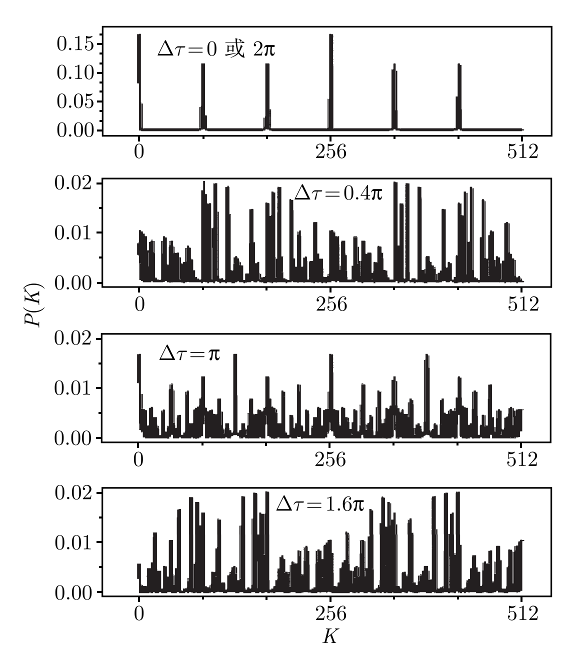


图 7.2.2 对不同时间延迟：$\Delta\tau=0,0.4\pi,\pi,1.6\pi,2\pi$，模拟 Shor 量子算法得到数态 $|k\rangle$ 的输出几率分布。这里，$N=21,Q=512,a=5$ 及 $r=6$

一般地，为了定量描述这些动力学位相导致的相干错误，我们引入一个与延迟时间相关的函数 $p_{\rm e}(k_{\rm e})$ 用来量化获得正确结果 $k_{\rm e}$ 的总概率，即

$$P_{\rm e}=\sum_{k_{\rm e}}p_{\rm e}(k_{\rm e}) \tag{7.2.13}$$

就是所有正确结果的输出率。理想情况下应该有 $P_{\rm e}=1$。图 7.2.3 分别给出了我们用 4, 9, 11 个工作比特对 $N=15,21,33$ (其中 $a=13,5,5$) 进行因子分解模拟所得到的正确输出结果 $P_{\rm e}$ 与延迟时间的关系。可见，在满足位相匹配条件下，总能够得到期望的结果。对于其他延迟情况，特别是当 $\tau\Delta=(\epsilon_1-\epsilon_0)\tau=(2n-1)\pi$ 时，动力学位相相干错误将完全抑制了正确的结果输出。

至此，我们已经完成了应用 Shor 量子算法对直到整数 33 的因子分解模拟。当

然这仅仅是一种利用电子计算机来实现的数值模拟，与在量子计算机上运行这一算法的真实情况还有本质的不同。最后我们强调，由动力学位相引起的相干错误和由于比特退相干引起的非相干错误之间是有本质性的不同的。原则上，相干错误不会造成信息损失，而且它是周期性变化的；但对相干错误如退相干效应而言，得到正确计算结果的概率将会随着计算时间的增长而呈某种指数形式的衰减。另外，动力学位相导致的幺正错误通常是以相同的方式在偏离所需量子操作中积累，虽然影响所期待量子干涉，但却并不会破坏量子存储器的相干特性；但退相干本质上是随机的，并且随着计算时间的增加这种错误的影响将是指数增强，并且是不可逆的。我们的工作说明了，在量子算法的运行过程中，除了客观环境导致的非相干错误必须进行纠正或避免外，与某些额外相干动力学演化相关的相干错误也是不可忽视的。

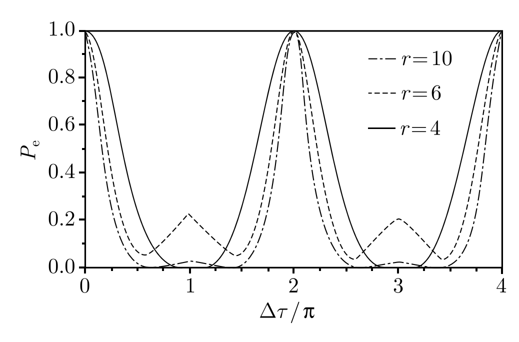


图 7.2.3　不同延迟条件下，用 4, 9, 11 个工作比特对 $N=15,21,33$ 进行因子分解 (其中 $a=13,5,5$) 所得到正确结果：$r=4,6,10$ 的概率

7.3　量子计算的各种可能实现方案

运行某个量子算法的过程就量子计算。如何实现这样的一个计算过程，或者换句话说，如何构造一台能运行量子算法的量子计算机，正是目前乃至未来相当长一段时间内量子信息科学的研究核心课题，甚至是其终极目标。本节简要综述目前的几种主要实现途径，为下节我们提出的绝热逻辑门量子计算方案提供一些背景知识。

7.3.1　逻辑门量子计算

作为经典电子计算机计算过程的直接对应，人们自然地想到，量子计算也可以由一系列基本量子逻辑门操作的组合来完成，这就是熟知的逻辑门量子计算方案。正如前面所提及的，这一方案中基本的逻辑操作是任意的一个两比特操作和单比特的任意旋转。因此，在目前量子计算机物理实现的最初研究阶段，大多数的工作

就是研究如何在各种可能的物理系统中有效地实现某一个两比特操作和任意的单比特旋转。一般而言，单比特操作是相对比较容易实现的。例如，对编码于光偏振特性的光子比特来说，单比特旋转可以通过简单的线性光学操作，如调节偏振角、使用各种分束和移相器等来实现；还有，像编码于自旋分量的电子自旋比特来说，单比特操作也是相对比较容易实现的，即通过施加一个可调节的磁场即可实现。但是，如何通过可控制的途径，在这些光子比特 (或电子自旋比特) 之间实现可调的相互作用，从而实现它们间的两比特操作则不是一件很容易做得到的事。相反，在某些固态比特所组成的微结构系统中，各比特之间通常是由一些不可调的电容和电感或者一些固有化学键耦合起来的，因而它们之间的两比特乃至多比特操作可以很自然地实现；但严格的单比特操作却不容易得到 (比如往往需要引入一些并不简单的去耦合操作)。

迄今为止，人们还不清楚究竟哪个物理系统是实现量子计算的最佳候选者。因而，针对不同的物理系统，人们发展了各种可能的方式来实现上述的基本逻辑门操作。概括起来，主要有以下几种。

1) 有限脉冲驱动法

这是目前受到最广泛关注的方案，其基本思想是利用某些可控制的快速操作 (比如有限时间长度内的电或者光脉冲) 来驱动量子比特，使其量子态按预设的某个途径演化到目标态。实验上常用的所谓 π- 脉冲就属于此类操作。要能实现这些调控，通常要求所选定的量子比特系统要能够比较理想地实现所谓的 Rabi 振荡，即能够人为地精确控制两个量子态之间的布居数转移。为了实现理想的两比特操作，还要求它们之间的相互作用是可以开关的。

2) 选择性测量法

1999 年 Gottesman 和 Chuang 证明, 采用 teleportation 和单比特操作可以完成通用的量子计算。若量子比特 1 的状态为 $|\alpha\rangle$, 量子比特 2 和 3 处于两比特最大纠缠态即 Bell 态。通过对量子比特 1,2 进行 Bell 测量，可以使量子比特 1 的信息转移到量子比特 3 上。量子比特 3 的状态与测量结果有关，它决定量子态从 1 到 3 进行何种变换。虽然这种方案也是通用的 (universal)，可是需要联合测量 (joint measurement), 这在实验上是比较难实现的。为克服这一缺陷，Raussendorf 和 Briegel 于 2001 年提出了一种新的基于量子测量的量子计算方案，它仅需要单比特的测量操作就可以实现。他们证明，只要量子计算机“芯片”中的量子比特处于很高纠缠度的纠缠态，如一种现在称为簇态 (cluster state) 的纠缠态上，那么各种基本的量子逻辑门操作都可以通过选择性地单比特量子测量的组合来实现。当然，这种计算方案中每一步运算的输出都与测量结果有关，所以下一次的测量总是基于前面测量的结果的。业已证明，这种也称之为单向的量子计算也是通用的。原则上，通过采取不同的测量次序和对不同的量子比特进行测量就可以实现任意的

量子逻辑操作，因而可以实现各种不同的量子算法。这种运算之所以是单向的，是因为量子测量本身就是非幺正的，而且在每次测量后系统的纠缠度都会降低，故而是不可逆的。经过一系列的测量操作之后，计算结果就会存储在最后没有被测量的作为寄存器的比特上。

3) 拓扑与几何位相法

在以上两种实现基本量子逻辑门的方案中，演化时间设置的不精确性 (可能来源于调控的精度有限，也可能来源于不可消除的周围环境的干扰等) 以及测量中不可避免的误差，都将影响它们实现的有效性或者说保真度。这些问题虽然可以通过建立各种可能的纠错方法来解决，但又有可能引入新的误差。

拓扑量子计算的提出给人们提供了解决这一普遍存在问题的一种新思路。我们知道，在很多物理系统中存在一种与其整体拓扑性质有关的状态，其准粒子激发是一种非 Abel 的任意子 (non-Abelian anyon)。之所以为任意子，是因为其特殊的统计特性。我们知道，对于两个粒子组成的系统，当它们交换后，系统的波函数要么不变 (Bose 子) 要么反相 (Fermi 子)。但对任意子系统来说，两个粒子交换后系统的波函数将有一个附加的相位，而且这个相位可以是任意的。当交换两个准粒子后，系统会从一个基态变化到另一个基态。利用这一特性，幺正变换可以用多次准粒子的交换操作来实现，而系统所达到的最终状态则取决于粒子交换的顺序。自然地，具有分数量子霍尔效应的体系被认为最有可能实现以上所说的拓扑量子计算。在这个系统里面，激发是特殊的二维准粒子。随着准粒子的交换，它们的轨道 (也称为世界线) 相互交叠形成辫子。显然，稍微的扰动并不会影响到辫子的拓扑性，故而拓扑量子计算的误差可以很低。

利用系统整体拓扑性质实现对动力学微扰不敏感的量子计算，也可以利用著名的 Berry 相位效应来实现。1984 年，Berry 首先发现，当系统循环演化一周后将会获得一个只与演化路径整体拓扑特性相关，而对演化路径本身不敏感的几何位相。所以，利用 Berry 位相效应，理论上是可以设计一些具有明显非局域特性的容错量子计算的。确实，Jones 等利用几何位相已经在 NMR 系统中实现了条件移相门。业已证明，利用绝热循环演化方法得到的几何位相，可以构造各种单比特位相门以及两比特的控制位相门等构成量子计算的各种基本逻辑门操作。

7.3.2 绝热量子计算

与以上各种通过实现基本逻辑门操作，从而构造量子计算网络的途径不同，Farhi 等于 2001 年提出来一种崭新的绝热量子计算方案。其基本思想是，首先把一个其 Hamilton 量比较简单的系统初始化到已知的基态，然后通过改变系统的参数，缓慢地调节系统的 Hamilton 量使系统绝热地演化到目标基态，即所求问题的基态上。注意在这一绝热的量子计算过程中，系统一直保持在其瞬时的基态上，故

而原则上不存在困扰前面各种逻辑门量子计算中的退相干问题。只要外界环境产生的扰动不足以使系统发生基态和第一激发态之间的跃迁时，系统将仍然保持在其基态上。显然，此方案中受控制的只是系统的 Hamilton 量，而不是用于编码量子信息的量子态本身。绝热量子计算的另一个明显的优点是，它对操纵所需要的时间长短并无要求而只是要求操纵是绝热的即可。

加拿大的 D-Wave 公司一直致力于绝热量子计算实现的研究。目前，其公开发表的论文表示已经用 128 个超导量子比特构造出具有集成计算功能的量子计算机。他们声称，构造规模上达到上万个量子比特，以适应更复杂的计算要求的绝热量子计算机也是可能的。当然，这些声称的绝热量子计算机到底是不是真正意义上的量子计算机还存在着许多争论。

7.3.3 小结

在上面对比中介绍中我们看到：

(1) 基于逻辑门的量子计算虽然具有普适性，但受到退相干问题的制约而难以大规模实现。原则上，任何量子计算任务都是在远小于退相干时间内完成，那么量子计算的实现就原则上没什么问题了。但是，在这一实现方案中，量子比特的激发态将被频繁地占据，即量子计算机的“芯片”经常被激发到其非常不稳定的激发态上。由此就带来了一个严重的退相干问题，即计算系统的量子相干性将被破坏。为此就要求量子计算要能在尽可能短的时间 (即退相干时间) 内完成。由于实际操作过程中脉冲的宽度总是有限的，所以就要求计算系统具有足够长的退相干时间。而实际上在目前的各种可能实现量子计算的物理系统中，退相干时间太短是急需解决的一个共同难题。另外，基本量子逻辑门的实现对所需要的脉冲长度是极为敏感的。

(2) 在绝热量子计算中原则上不存在退相干问题，从而理论上可以大规模实现。但因为每个待求问题的解是编码在某个特定的基态上的，故而缺乏明显的普适性。与逻辑门量子计算不同，在绝热量子计算中，虽然系统的 Hamilton 量一直在变化，但系统却一直处于其基态上 (即激发态上的布居一直保持为零)，故而不存在退相干问题的困扰。更重要的是它对绝热操纵的时间长短并不敏感。现在的问题是，可否在此基础上建立一个普适的绝热量子计算方案呢？下节将介绍我们对这一问题所做出的尝试。

7.4 绝热逻辑门量子计算

绝热操纵量子态的布居，一直是实现原子分子相干控制的一个有效方法。比如，在图 7.4.1 所示的一个 Λ 形三能级系统中，基态 $|1\rangle$ 和亚稳态 $|3\rangle$ 是电偶极跃

迁禁戒的，因而将不可能用电偶极跃迁脉冲实现它们之间的布居转移。为克服这一困难，引进了一种称为受激拉曼绝热渡越的方法。其基本思想是，在能级 $|1\rangle$ 与 $|2\rangle$ 之间施加一个电偶极跃迁脉冲 $\Omega_{\mathrm{p}}(t)$，而在 $|2\rangle$ 与 $|3\rangle$ 之间施加另一个电偶极 $\Omega_{\mathrm{s}}(t)$。假定所加的脉冲可以很好地调节，使得系统始终处于其瞬时本征值为零的瞬时本征态 (即所谓的暗态)

$$|\Phi_0(t)\rangle = \cos\theta(t)|1\rangle - \sin\theta(t)|3\rangle, \quad \theta(t) = \arctan[\Omega_{\mathrm{p}}(t)/\Omega_{\mathrm{s}}(t)] \tag{7.4.1}$$

显然，可以通过合理地设置脉冲形状，比如

$$\frac{\Omega_{\mathrm{p}}(t)}{\Omega_{\mathrm{s}}(t)} \longrightarrow \begin{cases} 0, & t \to -\infty \\ \infty, & t \to +\infty \end{cases} \tag{7.4.2}$$

则角度 $\theta(t)$ 将从 0 变到 $\pi/2$. 对应地，系统的暗态 $|\Phi_0(t)\rangle$ 将从初态 $|1\rangle$ 逐渐地过渡到 $|1\rangle$ 和 $|3\rangle$ 的叠加态，最后达到稳定的态 $|3\rangle$。这就实现了布居数从 $|1\rangle$ 态到其电偶极跃迁禁戒的 $|3\rangle$ 转移。但这里要强调的是，这种布居数转移是单向的，也就是说，这样设定的脉冲组合只能用于实现布居数从 $|1\rangle$ 态转移到 $|3\rangle$ 态上，反之则不行。这说明以上的布居数绝热转移过程并不能直接用于实现量子计算。

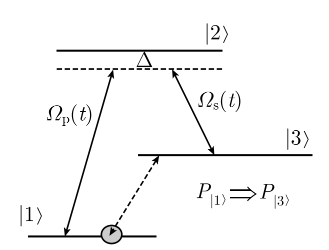


图 7.4.1　电偶极跃迁禁戒量子态布居之间的受激拉曼绝热渡越。这里，Δ 为失谐量，$\Omega_{\mathrm{p}}(t)$ 和 $\Omega_{\mathrm{s}}(t)$ 为所施加脉冲的 Rabi 频率

实现量子计算中所要求的基本逻辑操作，要求量子逻辑态之间的布居数绝热转移是双向的。为实现此目的，我们采用最简单的绝热布居数转移方案，即斯塔克啁啾快速绝热渡越 (Stark chirped rapid-adiabatic-passage) 方法。在此过程中，除了通常所施加的导致量子能级跃迁的 Rabi 脉冲外，还用了一个 Stark 脉冲来扰动量子比特的能级间距。通过合适地设置这两个脉冲，就可以使量子逻辑态上的布局转移不再是像 Rabi 振荡那样周期性地反转，而是从一个态完全地渡越到另一个态。

7.4.1　单比特逻辑门操作的实现

考虑如下一个受激单比特系统：

$$H(t) = \frac{\omega_0}{2}\sigma_z + R(t)\sigma_x - \Delta(t)\frac{\sigma_z}{2} \tag{7.4.3}$$

即一个两能级系统 (由 Hamilton 量 $H_0 = \omega_0\sigma_z/2$ 描述) 受 Rabi 脉冲 $R(t) = \Omega(t)\cos(\nu t)$ 和 Stark 脉冲 $\Delta(t)$ 的驱动。这是一个通常的 Rabi 振荡模型加上一个使能级发生 Stark 移动的驱动项。当外加驱动与两能级共振时，在相互作用表象

中此 Hamilton 量可表示为如下的矩阵形式：

$$H_{\text{int}}(t) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \Omega(t) \\ \Omega(t) & 2\Delta(t) \end{pmatrix} \tag{7.4.4}$$

容易证明存在如下的两个瞬时本征态：

$$|\lambda_+(t)\rangle = \sin\vartheta(t)|0\rangle + \cos\vartheta(t)|1\rangle \tag{7.4.5}$$

$$|\lambda_-(t)\rangle = \cos\vartheta(t)|0\rangle - \sin\vartheta(t)|1\rangle \tag{7.4.6}$$

它们对应的瞬时本征值为：$\mu_\pm(t) = (\Delta(t) \pm \sqrt{\Delta^2(t) + \Omega^2(t)})/2$。以 $|\lambda_\pm(t)\rangle$ 为新的基矢，上面的 Hamilton 量可改写为

$$H_{\text{new}}(t) = \begin{pmatrix} \mu_-(t) & -\mathrm{i}\dot{\vartheta}(t) \\ \mathrm{i}\dot{\vartheta}(t) & \mu_+(t) \end{pmatrix} \tag{7.4.7}$$

注意到此时的 Hamilton 量中的非对角元部分不为零，也就是说这两个基矢之间还存在着相互之间的跃迁。但是，只要绝热条件 $\dot{\vartheta}(t) = 0$, 即

$$\frac{1}{2}\left|\Omega(t)\frac{\mathrm{d}\Delta(t)}{\mathrm{d}t} - \Delta(t)\frac{\mathrm{d}\Omega(t)}{\mathrm{d}t}\right| \ll \left(\Delta^2(t) + \Omega^2(t)\right)^{3/2} \tag{7.4.8}$$

得以满足，那么这一受驱动的系统可以一直绝热地处于以上两个新基矢中的任意一个。但我们可以恰当地调控所施加的脉冲使布居在两个原始量子逻辑态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 上的比重改变，乃至完全转移。比如，当所施加的脉冲组合满足条件 $\cos\vartheta(t \to -\infty) = 1, \sin\vartheta(t \to \infty) = 1$ 时，可以实现如图 7.4.2 所示的绝热渡越过程：初始时刻所处的量子逻辑态 $|0\rangle = |\lambda_-(t \to -\infty)\rangle$ 经历 $|\lambda_-(t)\rangle$ 的变化绝热地渡越到 $|\lambda_-(t \to +\infty)\rangle = |1\rangle$；同理，初始时刻所处的量子逻辑态 $|1\rangle = |\lambda_+(t \to -\infty)\rangle$ 经历 $|\lambda_+(t)\rangle$ 的变化绝热地渡越到 $|\lambda_+(t \to +\infty)\rangle = |0\rangle$。而这一操作就是典型的一种单比特操作，即 σ_x 操作。

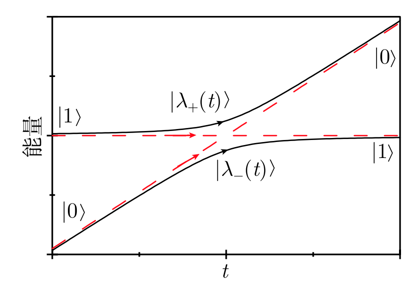


图 7.4.2 绝热渡越，$\Omega(t) = \Omega_0, \Delta(t) = v_0 t$

简单地，如果 $\Omega(t)=0$，则相互表象中的 $H_{\rm int}(t)$ 就变为 $H_z=\Delta(t)|1\rangle\langle 1|$。它导致一个单比特的位相逻辑门，即 $U_z(\alpha)=\exp({\rm i}\alpha|1\rangle\langle 1|)$，$\alpha=-\int_{t_0}^{t_{\rm f}}\Delta(t'){\rm d}t'$。这说明，如果量子比特处于 $|0\rangle$，那么这个操作将不会对它产生影响。而如果原子处于 $|1\rangle$，那么对它将会产生一个相移。注意在这一操作中量子逻辑态的布居数并没有变化。

原则上，只要实现了两个互不对易的单比特量子逻辑操作，那么任意的单比特旋转都可以通过它们的某种组合来实现。

7.4.2 两比特量子逻辑门操作的绝热操纵实现

一般情况下，两比特的量子操作是比较难实现的，原因是它要求两个比特之间要能有可调控的耦合，即它们之间的相互作用是可开关的：相互作用只发生在操作过程中，而在操作之前和完成以后都应该是为零的。例如，我们可以用一个相互作用可调的 XY 模型

$$\hat{H}=\sum_{j=1,2}\frac{\omega_0}{2}\sigma_j^z+\frac{\Omega'(t)}{2}\sum_{j\neq k=1,2}\sigma_j^+\sigma_k^- \tag{7.4.9}$$

中的一个相互作用 π- 脉冲：$\int_0^t\Omega'(t'){\rm d}t'=\pi$ 来实现两比特 i-SWAP 门：$|00\rangle\to|00\rangle$, $|11\rangle\to|11\rangle$, $|01\rangle\to i|10\rangle$, $|10\rangle\to i|01\rangle$。但在实际的物理系统中，这一要求通常不是那么容易能够达到的。比如，对光子比特来说，如何实现光子–光子相互作用本身就是一个极富挑战性的问题；对电子比特来说，电子–电子之间的 Coulomb 相互作用却是一直在起作用的；对大多数固态电路系统而言，比特间的相互作用一般是通过不再可变的电容或电感耦合起来的。

在我们的方案中，通过引入另一个可调参量来放宽对相互作用项 $\Omega'(t)$ 的要求。比如，我们可以引进一个作用于某个 (这里假定是第二个) 比特的 Stark 脉冲 $\Delta_2(t)$，从而得到一个驱动的 XY 模型

$$\hat{H}=\sum_{j=1,2}\frac{\omega_0}{2}\sigma_j^z+\frac{\Omega'(t)}{2}\sum_{j\neq k=1,2}\sigma_j^+\sigma_k^--\frac{\Delta_2(t)}{2}\sigma_2^z \tag{7.4.10}$$

在原相互作用表象中，此 Hamilton 量可表示为如下的矩阵形式：

$$H_{\rm int}(t)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-\Delta_2(t)&0&0&0\\0&-\Delta_2(t)&\Omega'(t)&0\\0&\Omega'(t)&\Delta_2(t)&0\\0&0&0&\Delta_2(t)\end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Omega'(t) & 0 \\ 0 & \Omega'(t) & 2\Delta_2(t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\Delta_2(t) \end{pmatrix} \tag{7.4.11}$$

可见，在此驱动过程中系统在态 $|00\rangle$ 及态 $|11\rangle$ 中的布居是不变的；但是，在不变子空间 $\{|01\rangle, |10\rangle\}$ 中系统的量子演化就等价于上面所讨论的单个受激量子比特演化，两个量子逻辑态 $|01\rangle$ 和 $|10\rangle$ 上的布居数可以绝热地交换。这就实现了两个量子比特之间的 SWAP 门操作。值得指出的是，这里对比特间相互作用 $\Omega'(t)$ 的要求仅仅是绝热条件 (7.4.8) 的满足，因而它甚至可以是不变的一个常数。

7.4.3 在超导位相比特系统中实现绝热逻辑门量子计算

以上所建议的绝热逻辑门量子计算方案是一个一般性的理论，它表明:

(1) 基本量子逻辑门操作可以通过绝热地操纵量子计算系统的量子态演化来实现。此演化对系统所施加的脉冲长短不再敏感，而只要求系统的演化是绝热进行的。当然，由于计算过程也涉及了激发态的布居，故而仍然要求较快的绝热操纵 (在退相干之前完成)。

(2) 原则上，任何可以实现 Stark 激发的物理系统都可以用来实现这一量子计算方案。我们注意到，在强驱动情况下几乎所有的原子分子都可以通过双光子过程实现 Stark 激发。但是，在某些人工量子系统如超导电路中，利用其量子逻辑态特有的宇称对称破缺性，需要的 Stark 激发将能非常容易地实现。

具有较长相干时间的超导电路可以简单地由一个电流偏置的大 Josephson 结构成，如图 7.4.3(a) 所示。

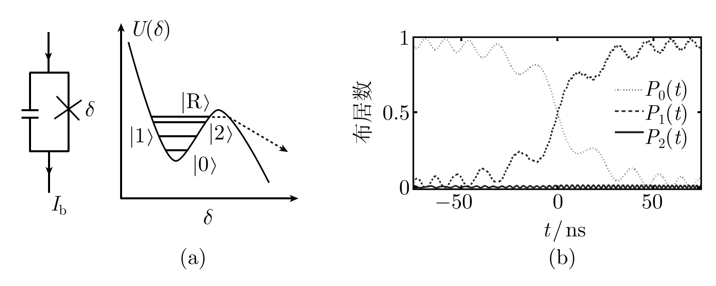


图 7.4.3 超导位相比特

(a) 表示通有偏置电流 I_b 的 Josephson 结 (结电容为 C_J) 及系统的等效势能图及其能级结构，其中 δ 为其规范不变位相，这里 $|0\rangle$, $|1\rangle$ 为编码比特信息的两个最低宏观能级；(b) 表示绝热操纵过程中，三个最低宏观能级的布居数变化

在一个较大的直流偏置电流用于定义系统的宏观能级之外，可以方便地施加两个随时间变化较小的电流脉冲：一个是通常的交流电流脉冲 $I_{ac}(t)$ (即 Rabi 脉

冲)，用于产生超导位相比特两能级间的 Rabi 振荡；另一个是电流方向恒定但幅度大小随时间而变化的直流电流脉冲 $I_{\mathrm{dc}}(t)$(即 Stark 脉冲)，用于实现对超导位相比特两能级间隔的连续调控。在以上三个偏置电流同时存在的情况下，受驱动的大 Josephson 结系统的原始 Hamilton 量可表示为

$$H(t) = H_0 - \frac{\Phi_0}{2}[I_{\mathrm{dc}}(t) + I_{\mathrm{ac}}(t)]\delta, \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{\Phi_0}{2}I_{\mathrm{b}}\delta, \quad m = C_{\mathrm{J}}(\Phi_0/2\pi) \quad (7.4.12)$$

其中，Φ_0 为磁通量子。超导位相量子比特由势阱中 I_{b} 偏置所定义的两个最低宏观能级: $\{|j\rangle, j = 0,1\}$, $H_0|j\rangle = E_j|j\rangle$ 编码而成。为了讨论绝热操作的有效性，我们还考虑了在所需 Rabi 脉冲: $I_{\mathrm{ac}}(t) = A_{01}(t)\cos(\omega_{01}t)$, $\omega_{01} = (E_1 - E_0)/\hbar$ 的作用下，另一个较高的能级 $|2\rangle$ 布居的影响。为此，我们在由三个最低能级组成完备基矢 $\{|j\rangle, j = 0,1,2\}$ 的相互作用表象中，将 Hamilton 量表示为

$$H_{\mathrm{int}}(t) = -\frac{\Phi_0}{2\pi}\begin{pmatrix} 0 & \frac{A_{01}(t)}{2}\delta_{01} & 0 \\ \frac{A_{01}(t)}{2}\delta_{10} & I_{\mathrm{dc}}(t)(\delta_{11} - \delta_{00}) & \frac{A_{01}(t)}{2}\delta_{12}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{10}-\omega_{21})t} \\ 0 & \frac{A_{01}(t)}{2}\delta_{21}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega_{10}-\omega_{21})t} & I_{\mathrm{dc}}(t)(\delta_{22} - \delta_{00}) \end{pmatrix} \quad (7.4.13)$$

其中, $\delta_{jk} = \langle j|\delta|k\rangle, j,k = 0,1,2$. 利用典型的实验数据：$C_{\mathrm{J}} = 4.3\mathrm{pF}$, $I_{\mathrm{c}} = 13.3\mathrm{A}$, $I_{\mathrm{b}} = 0.9725I_{\mathrm{c}}$, 图 7.4.3(b) 给出了我们的数值模拟结果。

这里，相关的参数取为：$\omega_{10} = 5.98$ GHz, $\omega_{21} = 5.64$ GHz，以及 $\delta_{00} = 1.4, \delta_{11} = 1.42, \delta_{22} = 1.45, \delta_{01} = \delta_{10} = 0.053, \delta_{12} = \delta_{21} = 0.077$ 和 $\delta_{02} = \delta_{20} = -0.004$。而且，我们选择的是在实验实现上最简单的一种驱动方式: $A_{01}(t) = \Omega =$ 常数，$I_{\mathrm{dc}}(t) = vt$，v 是个常数。可见，绝热操纵实现单比特基本量子逻辑门的操作过程，布居数转移到邻近较高能级上的效应是极其微弱而可以忽略不计的。显然，我们还可以通过控制这两个脉冲的相对大小来实现 Hadamard 门操作，即布居数在两个逻辑态时间的均匀分配，如图 7.4.4 所示。值得指出的是，以上的 Stark 脉冲是充分利用了系统的宇称对称破缺特性，即 $U(-\delta) \neq \pm U(\delta)$，从而 $\langle k|\delta|k\rangle \neq 0$ 来设计的。在自然界的原子分子系统中，$\langle k|\delta|k\rangle \equiv 0$，因而所需要的 Stark 脉冲将只能通过增强双光子过程来实现。

下面我们以一个实验上已经实现了的两比特超导电路来说明，绝热操纵方法同样可以用于实现两比特量子逻辑门操作。如图 7.4.5(a) 所示，考虑一个电容 C_{m} 耦合起来的，有相等直流偏置的两个 Josephson 结系统。这里，耦合电容将提供所需的 Rabi 脉冲，而 Stark 脉冲则通过在某个 Josephson 结施加一个小但幅度仍随时间变化的直流偏置来提供。

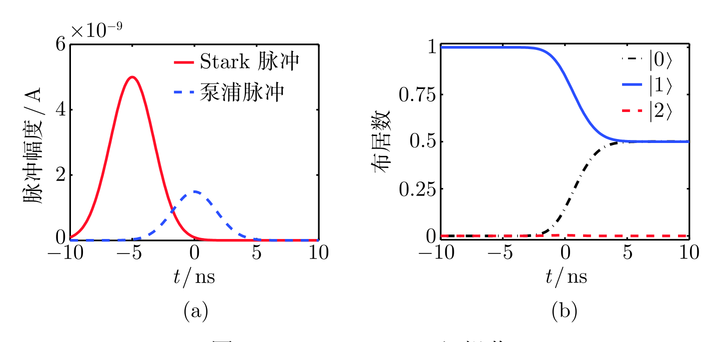


图 7.4.4 Hadamard 门操作

(a) 脉冲序列; (b) 布居

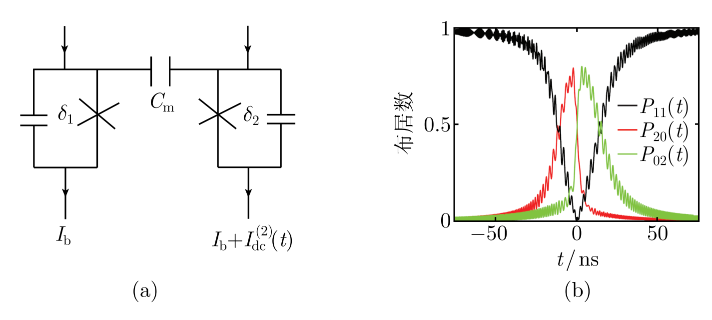


图 7.4.5 耦合两比特宏观能级布居数时间演化

(a) 耦合的两比特电路; (b) 绝热操纵过程中，三个最低宏观能级的布居数变化

这样一个电路系统的 Hamilton 量可以简单地表示成

$$H(t)=\sum_{j=1}^{2}H_{0j}+\left(\frac{2\pi}{\varPhi_0}\right)^2\frac{p_1p_2}{C'_m}-\left(\frac{\varPhi_0}{2\pi}\right)I_{dc}^{(2)}(t)\delta_2 \tag{7.4.14}$$

其中，$H_{0j}=\sum\limits_{k=0,1,2}E_k^{(j)}|k\rangle\langle k|$ 为第 j 个 Josephson 结的自由 Hamilton 量 (只考虑其最低的三个能级)；$C'_{\rm m}=C_{\rm J}(1+\zeta)$，而定义 $\zeta=C_{\rm m}/(C_{\rm J}+C_{\rm m})$。在相互作用表象中，此 Hamilton 量改写为

$$H_{\rm int}(t)=V_1(t)+V_2(t) \tag{7.4.15}$$

$$\begin{aligned}V_1(t)=&\left(\frac{2\pi}{\varPhi_0}\right)^2C_m'^{-1}\Bigg\{\sum_{j,k=0,1,2}|jk\rangle\langle jk|p_{jk}^{(1)}p_{jk}^{(2)}+\sum_{j,k=0,1,2,j\neq k}|jk\rangle\langle kj|p_{jk}^{(1)}p_{kj}^{(2)}\\&+|02\rangle\langle 11|p_{01}^{(1)}p_{21}^{(2)}\exp[-i(\omega_{10}-\omega_{21})t]+|11\rangle\langle 02|p_{10}^{(1)}p_{12}^{(2)}\exp[i(\omega_{10}-\omega_{21})t]\Bigg\}\\&+|20\rangle\langle 11|p_{21}^{(1)}p_{01}^{(2)}\exp[-i(\omega_{10}-\omega_{21})t]+|11\rangle\langle 20|p_{12}^{(1)}p_{10}^{(2)}\exp[i(\omega_{10}-\omega_{21})t]\},\\V_2(t)=&-\frac{\varPhi_0}{2\pi}I_{\rm dc}^{(2)}(t)\sum|jk\rangle\langle jk|\delta_{kk}^{(2)}\end{aligned}$$

容易看到，对应于此 Hamilton 量，存在几个不变的子空间：

(1) $Im_1 = \{|00\rangle\}$，其对应的 Hamilton 量是 $H_1 = E_{00}(t)|00\rangle\langle 00|$，$E_{00}(t) = -[\Phi_0/(2\pi)]I_{\rm dc}^{(2)}(t) + (2\pi/\Phi_0)^2 p_{00}^2/C'_m, p_{ll'} = \langle l_k|p_k|l'_k\rangle$, $\delta_{ll'} = \langle l_k|\delta_k|l'_k\rangle$;

(2) $Im_2 = \{|01\rangle, |10\rangle\}$，对应的 Hamilton 量 $H_2(t)$ 有与方程 (7.1.1) 同样的形式，只是这里 $\Omega(t) = 2(2\pi/\Phi_0)^2 p_{01}^2/C'_m=$ 常数及 $\Delta(t) = [\Phi_0/(2\pi)]I_{\rm dc}^{(2)}(t)(\delta_{11} - \delta_{00})$;

(3) $Im_3 = \{|02\rangle = |a\rangle, |11\rangle = |b\rangle, |20\rangle = |c\rangle\}$，其对应的 Hamilton 量可表示为如下的矩阵形式：

$$H_3(t) = \begin{pmatrix} E_a(t) & \Omega_{ab}\exp(-{\rm i}\vartheta t) & \Omega_{ac} \\ \Omega_{ba}\exp(i\vartheta t) & E_b(t) & \Omega_{bc}\exp({\rm i}\vartheta t) \\ \Omega_{ca} & \Omega_{cb}\exp(-i\vartheta t) & E_c(t) \end{pmatrix} \tag{7.4.16}$$

其中

$$E_a(t) = -(\Phi_0/2\pi)I_{dc}^{(2)}(t)\delta_{22} + (2\pi/\Phi_0)^2 C_m^{'-1} p_{00}p_{22}$$
$$E_b(t) = -(\Phi_0/2\pi)I_{dc}^{(2)}(t)\delta_{11} + (2\pi/\Phi_0)^2 C_m^{'-1} p_{11}^2$$
$$E_c(t) = -(\Phi_0/2\pi)I_{dc}^{(2)}(t)\delta_{00} + (2\pi/\Phi_0)^2 C_m^{'-1} p_{22}p_{00}$$

以及

$$\Omega_{ab} = \Omega_{ba} = (2\pi/\Phi_0)^2 C_m^{'-1} p_{10}p_{12}, \quad \Omega_{ac} = \Omega_{ca} = (2\pi/\Phi_0)^2 C_m^{'-1} p_{20}p_{02}$$
$$\Omega_{cb} = \Omega_{bc} = (2\pi/\Phi_0)^2 C_m^{'-1} p_{12}p_{10}, \quad \vartheta = \omega_{10} - \omega_{21}$$

为了实现两比特之间的 SWAP 逻辑门操作，我们需要通过绝热操纵来实现量子逻辑态 $|10\rangle$ 与 $|01\rangle$ 之间的布居数完全转移，即 $|01\rangle \longrightarrow |10\rangle, |10\rangle \longrightarrow |01\rangle$；并保持布居数在量子逻辑态 $|00\rangle$ 及 $|11\rangle$ 上不变。显然，第一点要求可以类比于前面单比特系统中绝热操纵实现 σ_x 门操作的方法来达到。因为 Im_2 不变子空间形式上就等价于一个逻辑态为 $|0'\rangle = |01\rangle$ 和 $|1'\rangle = |10\rangle$ 的单比特系统，这里，所施加的脉冲是常数的 Rabi 耦合和由变化的直流脉冲 $I_{\rm dc}^{(2)}(t) = v_2 t$ 所导致的 Stark 脉冲。在这一脉冲条件下，还得确保：$|00\rangle \longrightarrow |00\rangle$ 及 $|11\rangle \longrightarrow |11\rangle$。由于 $|00\rangle$ 单独构成一个不变子空间，故其布居数将一直保持不变。而对于此脉冲过程中量子逻辑态 $|11\rangle$ 的布居数变化，则需在不变子空间 Im_3 中讨论。图 7.4.5(b) 给出了在参数条件 $\zeta = 0.05$, $v_2 = 3.0{\rm nA/nS}$ 下此脉冲过程中初态 $|11\rangle$ 的布居数变化情况：初始时刻处于 $|11\rangle$，随着脉冲过程的进行，其布居数逐渐地转移到了 $|02\rangle$ 和 $|20\rangle$ 态上，但最后又逐渐地回复到 $|11\rangle$。也就是说，在绝热操纵的前后态 $|11\rangle$ 的布居数是不变的。所以，通过绝热地操纵布居数在两比特量子逻辑态上的转移来实现两比特量子逻辑门操作，在实验是完全可以实现的。从我们所举的实际例子可以看到，无论是在单比特，还是在两比特系统，绝热操纵导致的计算空间之外量子态的激发都是非常微弱从而可以忽略不计的。

参 考 文 献

Deutsch D, Jozsa R. 1992. Rapid solution of problems by quantum computation. Proc. R. Soc. London A, 439: 553

Farhi E, Goldstone J, Gutmann S, et al. 2001. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an NP-complete problem. Science, 292: 472

Feynman R P. 1982. Simulating physics with computers. Int. J. Theor. Phys., 21: 467

Gottesman D, Chuang I L. 1999. Quantum teleportation is a universal computational primitive. Nature, 402: 390

Jones J A, Vedral V, Ekert A, et al. 2000. Geometric quantum computation using nuclear magnetic resonance. Nature (London), 403: 869

Nie W, Huang J S, Shi X, et al. 2010. Quantum state engineering with flux-biased Josephson phase qubits by rapid adiabatic passages. Phys. Rev., A82: 032319

Pachos J, Zanardi P, Rasetti M. 1999. Non-Abelian Berry connections for quantum computation. Phys. Rev., A61: 010305(R)

Raussendorf R, Briegel H J. 2001. A one-way quantum computer a one-way quantum computer. Phys. Rev. Lett., 86: 5188

Raussendorf R, Browne D E, Briegel H J. 2003. Measurement-based quantum computation on cluster states. Phys. Rev., A68: 022312

Sarma S D, Freedman M, Nayak C. 2008. Topological quantum computation. Phys. Today, 2006, 59: 32; Rev. Mod. Phys., 80: 1083

Shor P W, SIAM J. 1997. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. Comput., 26: 1484

Vandersypen L M K, Steffen M, Breyta G, Yannoni C S, et al. 2001. Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance. Nature, 414: 883

Verstraete F, Cirac J I. 2004. Valence-bond states for quantum computation. Phys. Rev., A70: 060302(R)

Wei L F, Li X, Hu X D, et al. 2005. Effects of dynamical phases in Shor's factoring algorithm with operational delays. Phys. Rev., A71: 022317

Wei L F, Johansson J R, Cen L X, et al. 2008. Controllable coherent population transfers in superconducting qubits for quantum computing. Phys. Rev. Lett., 100: 113601

Yatsenko L P, Shore B W, Halfmann T, et al. 1999. Source of metastable H(2s) atoms using the Stark chirped rapid-adiabatic-passage technique. Phys. Rev., A60: R4237

Zhu S L, Wang Z D. 2002. Implementation of universal quantum gates based on nonadiabatic geometric phases. Phys. Rev. Lett., 89: 097902

第 8 章　利用宏观量子相干效应验证量子力学中的非定域性关联

本章的内容主要取材于我们的三篇论文，即 PRA **73**，052307 (2006)；PRB **72**，104516 (2005)；及 PRL **96**，246803 (2006)。在简单介绍证实的宏观量子相干效应的超导电子学实验后，我们着重讨论如何利用这一效应来验证量子力学中的一个基本原理, 即 Bell 定理，从而为在宏观尺度上证实量子非定域性的存在，以及否定存在任何决定力学量取值的“物理实在”元素 (即隐变量) 提供参考。我们的工作虽然是以超导电子学中的电荷量子电路系统为具体的物理实现平台，但同样适用于其他的宏观量子相干系统，比如超导位相量子比特电路和分子磁体等。

8.1　宏观尺度上的量子相干效应

通常认为，量子现象是微观系统所特有的一种物理特征，比如我们所熟知的波粒二象性：即微观粒子既是粒子 (有能量和动量) 也是波 (几率波，它也能呈现出波动性所特有的干涉和衍射现象)。因而，一般来说宏观尺度上物理客体所表现出来的应当是一些完全的经典行为，比如要么是粒子性要么是波动性而不能两者兼有。然而，凝聚物质系统中的超导、超流等与 Bose-Einstein 凝聚有关现象的实验证实，使人们意识到了，量子效应并非是微观系统所独有：在某些极端条件下 (如在极低温环境中) 宏观系统也表现出一些明显的量子效应，比如量子隧穿现象等。应该说，通常所说的超导和超流等宏观量子现象只是系统中大量微观客体所表现出来的一种集体量子行为。20 世纪 80 年代在电流偏置超导约瑟夫森结系统中所观察到的宏观量子隧穿现象，也只是说明了其宏观波函数作为序参量描述超导系统的合理性。但序参量中的各种宏观自由度，比如规范不变的位相，仍然是一个经典变量。

所谓“宏观量子相干”指的则是与系统宏观自由度的量子化相对应的，并满足态叠加原理的物理行为。显然，量子化的宏观自由度在实验上是极其难以观测到的，所以直到 20 世纪末人们才在超导电子学实验中证实了宏观量子相干性的存在。为了本章内容的相对完整性，下面我们先简要介绍这一著名的实验。实验所用的系统是由两个很小的 Josephson 结分隔形成的一个超导 Cooper 对岛，如图 8.1.1 所示。

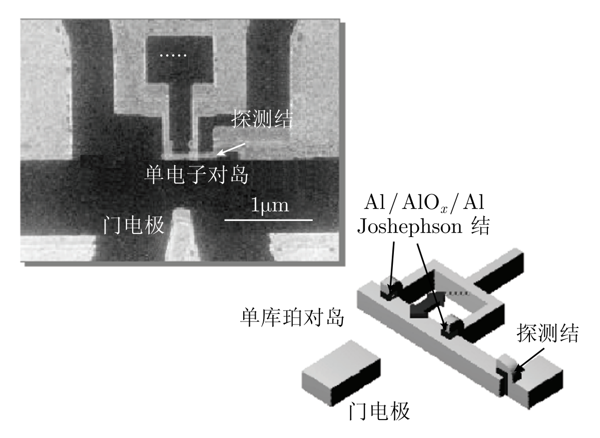


图 8.1.1　实现宏观量子相干性观测的超导电子学实验系统

这里，一个超导 Cooper 对岛通过两个 Al/AlO$_x$/Al 构成的 Josephson 结来定义，岛上的 Cooper 对数目由通过探测结的电流来量测；岛上 Cooper 对数目可以通过调节门电极上的电压大小来控制

通过对宏观自由度进行正则量子化，我们首先对这一实验系统的量子相干行为做些理论上的描述。显然，在这一候选的宏观量子力学系统中，通过约瑟夫森结的规范不变位相 δ 就是所谓的“广义坐标”，其对应的“广义速度”就由 Josephson 结关系：$\mathrm{d}\delta/\mathrm{d}t=(2\pi/\Phi_0)V_{\mathrm{J}}$ 来支配。这里，V_{J} 是加在结两端的电压。按标准的正则量子化手续，我们先写出电路的 Larganian

$$L(\delta,\dot{\delta})=\frac{2C_{\mathrm{J}}+C_{\mathrm{g}}}{2}\left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\dot{\delta}\right)^2-C_{\mathrm{g}}V_{\mathrm{g}}\frac{\Phi_0}{2\pi}\dot{\delta}-2\varepsilon_{\mathrm{J}}\cos\left(\frac{\pi\Phi_{\mathrm{e}}}{\Phi_0}\right)\cos\delta \tag{8.1.1}$$

进而定义正则动量为

$$p=\frac{\partial L(\delta,\dot{\delta})}{\partial\dot{\delta}}=(2C_{\mathrm{J}}+C_{\mathrm{g}})\left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\right)^2\dot{\delta}-C_{\mathrm{g}}V_{\mathrm{g}}\left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\right) \tag{8.1.2}$$

然后对广义坐标 δ 和正则动量 p 进行正则量子化：$\delta\to\hat{\delta}$, $p\to\hat{p}$ 以及 $[\hat{\delta},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$，并写出电路的量子化 Hamilton 量

$$\hat{H}=\frac{(2\pi\hat{p}/\Phi_0+C_{\mathrm{g}}V_{\mathrm{g}})^2}{2C_{\mathrm{t}}}+2\varepsilon_{\mathrm{J}}\cos\left(\frac{\pi\Phi_{\mathrm{e}}}{\Phi_0}\right)\cos\hat{\delta},\quad C_{\mathrm{t}}=2C_{\mathrm{J}}+C_{\mathrm{g}} \tag{8.1.3}$$

其中，C_{g}, V_{g}; C_{J}, ε_{J} 分别是门电极与 Cooper 对岛之间的电容、电压；单个 Josephson 结的电容和 Josephson 结能量等。定义：$2\pi\hat{p}/\Phi_0=2\hat{n}e$, $C_{\mathrm{g}}V_{\mathrm{g}}=-2n_{\mathrm{g}}e$，则可将此 Hamilton 量写为 Cooper 对数态表象中的形式

$$\hat{H}=\frac{4e^2(\hat{n}-n_{\mathrm{g}})^2}{2C_{\mathrm{t}}}+2\varepsilon_{\mathrm{J}}\cos\left(\frac{\pi\Phi_{\mathrm{e}}}{\Phi_0}\right)\sum_{n=0}\frac{|n\rangle\langle n+1|+|n+1\rangle\langle n|}{2} \tag{8.1.4}$$

显然，通过控制门电压 V_{g} 可以调控此 Hamilton 量及其相应的量子动力学行为。在极低温 (毫开量级) 和小结极限下 ($E_{\mathrm{C}} = 4e^2/2C_{\mathrm{t}} \gg \varepsilon_{\mathrm{J}}$)，我们可以只考虑最低的两个数态所组成的子空间 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 的演化。容易证明，在远离简并点 $n_{\mathrm{g}} = 1/2$ 时，由于 $E_{\mathrm{C}} = 4e^2/2C_{\mathrm{t}} \gg E_{\mathrm{J}} = 2\varepsilon_{\mathrm{J}}\cos(\pi\Phi_e/\Phi_0)$，故而 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 都是相应 Hamilton 量的本征函数；但在简并点处，系统 Hamilton 量的本征值则是 $|\pm\rangle = (|0\rangle \pm |1\rangle)/\sqrt{2}$。

实验中，初始时刻 Cooper 对岛被偏置于远离简并点处，这即意味着系统处于其低能量本征态上 $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$；然后施加一个快速 (比如在几十皮秒时间内完成) 的门电压脉冲，使岛被快速地偏置到其简并点处，这时系统还来不及演化而仍然处于其初态 (用简并点处本征态来表示则是 $|\psi(0)\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$)。随后，在自由演化时间 Δt 以后，再来测量系统处于 $|1\rangle$ 的几率 (这对应于通过探测结测量其流过的电流)。理论上，此自由演化到时刻 Δt 的状态可表示为

$$|\psi(\Delta t)\rangle = \cos(E_{\mathrm{J}}\Delta t/2\hbar)|0\rangle - \mathrm{i}\sin(E_{\mathrm{J}}\Delta t/2\hbar) \tag{8.1.5}$$

因而，Δt 时刻所测到的电流应为 $I(\Delta t) = \sin^2(E_{\mathrm{J}}\Delta t/2\hbar)$. 图 8.1.2 给出了相关理论模拟与实验数据测量结果的比较。可见，两者符合得非常好。这就充分证实了在这一超导电子学系统中确实观测到了与宏观位相变量 δ 量子化相关的宏观量子相干现象：宏观能级的存在性以及宏观量子态的叠加性。

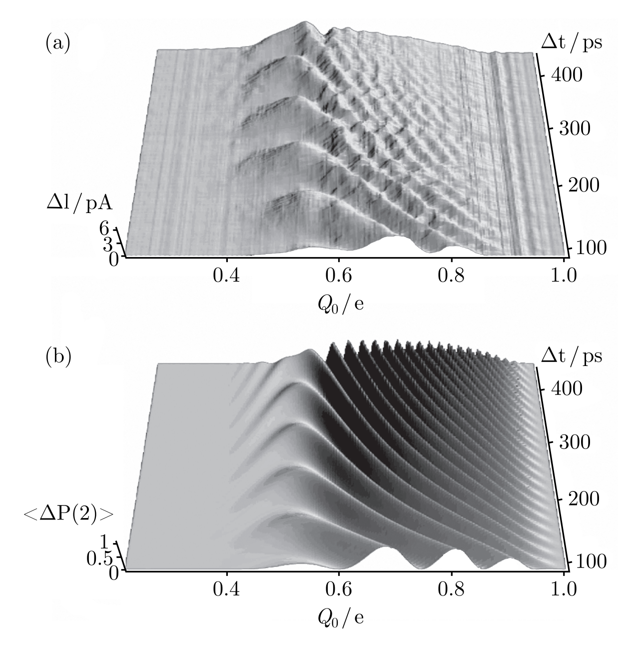


图 8.1.2　Cooper 对岛隧穿电流的量子相干性理论预言及其与实验测量结果的比较

(a) 理论预言; (b) 实验测量结果。可见，两者符合得非常好

本章以后所介绍的工作，基本上都是以这一实验观测结果为基础的。我们看到，很少有一个科学理论像量子力学这样，从建立以来关于其理论基础和基本逻辑上的理解与解释都一直争议不断。尽管各种成功的应用已经相当令人信服地证实了量子力学理论的正确性，但仍然需要更多的实验来证实其理论基础的完备性和逻辑上的自洽性。上面的这个实验充分证实了在宏观尺度上仍然是可以存在量子相干性的，这就预示着量子力学的基本理论是可以应用到这一类宏观物理系统中去的。当然，在这些系统中实现量子力学基本原理的验证，将为这些应用提供可靠而具体的保证。

8.2 在超导电路中通过验证 Bell 不等式来验证量子力学中的非局域关联

量子力学理论所受到的一个典型的质疑是其“描述上的不完备性”。这一责难首先是由 Einstein-Podolsky-Rosen(EPR) 三人提出的。他们所坚持的前提是，如果能够确定地预测一个物理量的取值，那么对应于这一物理量一定存在一个物理实在元素 (即经典的 Laplace 决定论)；空间上分开且没有超距作用的两个物理系统各自的物理量的取值应当是独立而不相关联的 (即不存在非局域关联)。显然这些论断和量子力学的基本原理是相违背的，比如，量子力学中确实存在的 EPR 态实际上就隐含了非局域关联的存在和合理性。

为了调和这一矛盾，“隐变量”理论应运而生。其基本思想是，存在一种隐含的变量，关于这种变量的理论都是定域和决定性的；量子力学理论本身所表现出来的非决定性和非局域性，都是对这一变量做系综统计平均的结果。因而，隐变量是否确实存在就成了量子力学理论是否完备的关键性判据。1965 年，Bell 断言，任何一个定域、决定论的隐变量理论所导致的结论都不可能和量子力学所预言的结果相容。许多年以来，人们做了很多工作来试图验证这一论断 (现在称为 Bell 定理) 的正确性。但所用的物理客体大多是一些微观粒子，比如光子、中子和离子等。这里我们将讨论，如何在宏观尺度上来实现这一定理的验证。

8.2.1 Bell 不等式

一个在实验上比较方便验证 Bell 定理正确性的方法是，验证所谓的 CHSH-Bell 不等式是否违背。这个不等式正是在隐变量理论的框架内导出来的。事实上，如果存在一个不能为现实实验技术所控制的隐变数 λ，它将“诡异地”影响着两个非局域粒子的测量结果：隐变量理论认为，第一个粒子的物理量 $A(\alpha)$ 和第二个粒子的物理量 $B(\beta)$ 都是由这个 “定域隐变量”λ 按一定的关系函数所决定的。为简单起

见，假定 A, B 的取值都只能是 ± 1，亦即

$$A(\alpha, \lambda) = \pm 1, \quad B(\beta, \lambda) = \pm 1 \tag{8.2.1}$$

也就是说，λ 取某种值时测量值是 $+1$，而当 λ 取另外一些值时他们的测量值则为 -1。定域性指的是，粒子 1 的取值 A 与粒子 2 的 β 参数无关；同时粒子 2 的取值 B 也与粒子 1 的 α 参数无关。设 $\rho(\lambda)$ 是 λ 归一化的几率分布函数，即 $\rho(\lambda) \leqslant 1$，$\int \rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda = 1$。那么，按照“定域隐变量”理论的预期，粒子 1 的局域变量 A 和粒子 2 的局域变量 B 之间的关联的期望值为

$$E(\alpha, \beta) = \int A(\alpha, \lambda) B(\beta, \lambda) \rho(\lambda) \mathrm{d}\lambda \tag{8.2.2}$$

注意到，$A(\alpha, \lambda)$, $A(\alpha', \lambda)$, $B(\beta, \lambda)$, $B(\beta', \lambda) = \pm 1$, 则

$$[A(\alpha, \lambda) + A(\alpha', \lambda)] B(\beta, \lambda) - [A(\alpha, \lambda) - A(\alpha', \lambda)] B(\beta', \lambda) = \pm 2 \tag{8.2.3}$$

即

$$E(\alpha, \beta) + E(\alpha', \beta) - E(\alpha, \beta') + E(\alpha', \beta') = \pm 2 \tag{8.2.4}$$

考虑到测量过程中的不准确性，比如有时测不到结果或信号弱化等，因而对任意的 α, β 我们有

$$-1 \leqslant A(\alpha, \lambda) B(\beta, \lambda) \leqslant 1, \quad |E(\alpha, \beta)| \leqslant 1$$

故

$$|E(\alpha, \beta) + E(\alpha', \beta) - E(\alpha, \beta') + E(\alpha', \beta')| \leqslant 2 \tag{8.2.5}$$

这就是常常被实验验证的 CHSH-Bell 不等式，它完全是基于经典定域决定性理论基础上得出的，如果所谓的隐变量理论成立的话，那就说明目前的量子力学确实是不完备的；反之，如果这一不等式被违背，那就说明量子力学理论体系所预言的非定域性关联是物理世界存在的一种事实。当然，并不是所有的量子体系都将违背这一定理，但只要发现其违背，哪怕是一些特例，也足够说明在正确的量子力学理论框架中是不容许隐变量假定的。

在以上的推导过程中我们看到，要对这一定理进行实验验证，需要具备两个条件：① 要能找到两个非局域的量子客体，它们能够用量子力学中最基本的态叠加原理来描述；② 实验上要能实现关联函数 $E(\alpha, \beta)$ 的有效测量。第一点要求整个系统 (即两个非局域的量子客体) 应当被制备于某种叠加态上，通常是一些现在称之为纠缠的量子态；而对于第二点，则需要找到实验上如何有效地测出关联函数。

首先，测量 $A(\alpha,\lambda)$ 所得到的值 x 只能是 ±1，也就是说，测量 A 时得到 x 的某个取值的几率可表示为：$P_x = \int[1+xA(\alpha,\lambda)\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda]/2=0$，或者 1。进而，测量 A 得到值 x 和测量 B 得到值 y 的联合概率可表示为

$$P_{xy}=\int\frac{1+xA(\alpha,\lambda)}{2}\cdot\frac{1+yB(\alpha,\lambda)}{2}\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda$$

容易验证

$$P_{++}=\int\frac{1+A(\alpha,\lambda)}{2}\cdot\frac{1+B(\beta,\lambda)}{2}\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda$$

$$P_{--}=\int\frac{1-A(\alpha,\lambda)}{2}\cdot\frac{1-B(\beta,\lambda)}{2}\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda$$

$$P_{+-}=\int\frac{1+A(\alpha,\lambda)}{2}\cdot\frac{1-B(\beta,\lambda)}{2}\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda$$

$$P_{-+}=\int\frac{1-A(\alpha,\lambda)}{2}\cdot\frac{1+B(\beta,\lambda)}{2}\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda$$

故

$$P_{++}+P_{--}-P_{+-}-P_{-+}=\int A(\alpha,\lambda)B(\beta,\lambda)\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda=E(\alpha,\beta) \tag{8.2.6}$$

这说明，局域变量 α 及 β 的关联 $E(\alpha,\beta)$ 可以通过联合测量 A,B 来确定：等于两者得到相同取值的几率减去得到不同取值的几率。

在过去的几十年时间里，人们已经利用纠缠光子对在相当高的精度上实现了 Bell 不等式可以违背的验证，从而否定了所谓隐变量的存在。这些光子对可以利用原子的级联辐射来产生，也可以通过非线性晶体中的参量下转换过程来获得。后来，人们甚至在中介子、Rydberg 原子、半导体中的弹道电子和囚禁离子等有静止质量的微观粒子系统也证实了 Bell 不等式的违背性。这里，我们将介绍如何利用实验上已经实现的超导宏观量子电路来进行 Bell 不等式的验证。

8.2.2 利用近似单比特操作进行近似局域变量编码的 Bell 不等式验证

考虑如图 8.2.1 所示的两比特超导电路，它是实际实验电路的一种简化，其 Hamiltonian 为

$$\hat{H}=\sum_{j=1,2}[E_{C_j}(\hat{n}_j-n_{g_j})^2-E_J^{(j)}\cos\hat{\theta}_j]+E_m\prod_{j=1}^{2}(\hat{n}_j-n_{g_j}) \tag{8.2.7}$$

其中，第 j 个盒子的过量 Cooper 对数 $\hat{n}_j$ 和相位算符 $\hat{\theta}_j$ 是共轭的：$[\hat{n}_j,\hat{\theta}_j]=\mathrm{i}\delta$，$E_{C_j}=4e^2C_{\sum_k}/C_{\sum}, j\neq k=1,2$ 和 $E_J^{(j)}=2\varepsilon_{J_j}\cos(\pi\Phi_j/\Phi_0)$ 分别是第 j 个盒子的电荷和 Josephson 能量，而 $E_m=4e^2C_m/C_{\sum}$ 是两比特之间的耦合强度。其

中，ε_{J_j} 和 $C_{\sum_j}$ 分别是第 j 个比特的 Josephson 能量和总电容，而且 $C_{\sum}=C_{\sum_1}C_{\sum_2}$ 和 $n_{g_j}=C_{g_j}V_J/(2e)$。在满足极端的工作条件 $k_{\mathrm{B}}T\ll\varepsilon_{J_j}\ll E_{C_j}\ll\Delta$ 下，准粒子隧穿和激发都可以忽略不计。这里，k_{B},T,Δ 和 $2\varepsilon_{J_j}$ 分别是 Boltzmann 常量、温度、超导能隙和第 j 个电荷比特的最大 Josephson 能量。假定两个 Cooper 对岛都工作于其近简并点附近 (即 $n_{g_1}=n_{g_2}=1/2$)，则系统的动力学仅涉及四个最低能量的量子态 $|00\rangle,|10\rangle,|01\rangle$ 和 $|11\rangle$。由此，上面的 Hamiltonian 可以简化为

$$\hat{H}=\sum_{j=1,2}\frac{1}{2}[E_C^{(j)}\sigma_z^{(j)}-E_J^{(j)}\sigma_x^{(j)}]+E_{12}\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)} \tag{8.2.8}$$

其中，$E_{12}=E_m/4$ 和 $E_C^{(j)}=E_{C_j}(n_{g_j}-1/2)+E_m(n_{g_k}-1/4)$。这里赝自旋算符的定义是：$\sigma_z^{(j)}=|0_j\rangle\langle 0_j|-|1_j\rangle\langle 1_j|$ 和 $\sigma_x^{(j)}=|0_j\rangle\langle 1_j|+|1_j\rangle\langle 0_j|$。这里的下标 j(或 k) 是用来标注第 j(或 k) 个量子比特的量子态。例如，$|0_j\rangle$ 代表第 j(或 k) 个量子比特是“0”。为了简化，两比特态 $|mn\rangle$(其中，$m,n=0,1$) 的上标被忽略掉。显然，比特间的耦合能量 $E_{12}=E_m/4$ 是由耦合电容 C_m 决定的，是不调的。然而，$E_C^{(j)}$ 和 $E_J^{(j)}$ 则可以分别通过门电压 V_j 和磁通 Φ_j 来调节。

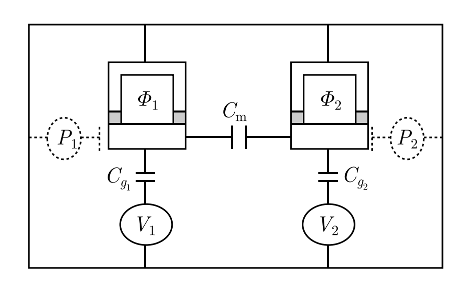


图 8.2.1 两个通过电容耦合起来的超导电荷量子比特

两个 Cooper 岛上的 Cooper 对数目 (量子比特) 可以通过偏置门电压 V_1,V_2 来控制，外置磁通 Φ_1,Φ_2 (穿过 SQUID 回路) 用于调控其有效 Josephson 隧穿能。P_1 和 P_2 (虚线部分) 则用于读取量子比特的状态

我们的验证方案包括如下的两个步骤。

1) 制备可能违背 Bell 不等式的宏观量子态

大量的研究表明，著名的 Bell 态将是最大违背 Bell 不等式的量子态。因此，我们将首先制备这一两比特超导电路的 Bell 态。

自然地，我们假定开始时电路已经被初始化到其基态 $|\psi_0\rangle=|00\rangle$ 上，这可以通过使电压合适地偏置使系统工作于远离能级简并点 ($n_g=1/2$) 处，而且 $E_J^{(1)}=E_J^{(2)}=0$ 来达到。首先，我们对选定的一个量子比特 (比如第一个量子比特) 实行一个条件性单比特操作 (实际上是一个两比特操作，是保持一个比特不演化的情况下对另一个比特进行操作)，即设定一个快速脉冲 t_j，使得 $E_J^{(1)}\neq 0$, $E_C^{(1)}=-2E_{12}$，

从而导致一个演化 $\hat{U}_{-}^{(1)}(\theta_j) = I_1 \otimes |1_2\rangle\langle 1_2| + [I_1 \cos\theta_1 + \mathrm{i}\sigma_j^x \sin\theta_1] \otimes |0_2\rangle\langle 0_2|$

$$|\psi_0\rangle = |00\rangle \xrightarrow{\hat{U}_{-}^{(1)}(\theta_1)} |\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm \mathrm{i}|10\rangle) \tag{8.2.9}$$

这里持续时间被设置成满足条件：$\cos(t_1\lambda_j/\hbar) = 1$, $\lambda_1 = \sqrt{4E_{12}^2 + (E_J^{(1)}/2)^2}$ 和 $\sin\theta_1 = \pm 1/\sqrt{2}$, $\theta_1 = t_1 E_J^{(1)}/2\hbar$。接下来我们在保持 $|00\rangle$ 不变的情况下，通过实现演化 $|10\rangle \longrightarrow |11\rangle$ 来确定性地制备 Bell 态

$$|\Psi_{\pm}\rangle \xrightarrow{U_{+}^{(2)}(\theta_2)} |\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm \mathrm{i}|11\rangle) \tag{8.2.10}$$

其中，操作 $U_{+}^{(2)}$ 是通过偏置 $E_J^{(2)} \neq 0$, $E_C^{(2)} = 2E_{12}$，并取脉冲持续时间 t_2 满足条件 $\cos(\lambda_2 t_2/\hbar) = \sin\theta_2 = 1$, $\lambda_1 = \sqrt{4E_{12}^2 + (E_J^{(1)}/2)^2}$, $\theta_2 = t_2 E_J^{(2)}/2\hbar$ 来实现的。

当然，这样的态制备在实验上是需要验证的。这通常是通过一种叫量子态的 tomorgaphic 技术将其对应的密度矩阵重构出来。制备得是否足够地接近想要制备的量子态，则需要与理想情况下该量子态的密度矩阵进行对比。在这里我们不再详细描述如何利用这一技术来进行这些验证，感兴趣的读者可参考相关文献。要利用所制备出来的 Bell 态进行 Bell 不等式的验证，还必须要求所制备出来的 Bell 态的寿命足够的长。理论上这是可能的，因为完成以上两步脉冲制备操作后，电路又被偏置回其初始时 $E_C^{(j)} = E_J^{(j)} \equiv 0$ 的"闲着"状态。这时，电路的 Hamilton 量可简单地表示为 $H_{\mathrm{s}} = E_{12}\sigma_1^z\sigma_2^z$，而所制备出来的 Bell 态正是其本征态之一，因而其寿命在理论上应该是足够长。我们的数值结果也证实了这一点。

2) 利用近似的单比特操作进行近似的局域性编码，并通过两比特的联合测量得到关联函数 $E(\alpha, \beta)$

实验验证 Bell 不等式的另一个关键问题是测量两个局域变量 α 和 β 之间的关联。变量 α 和 β 的局域性意味着它们应分别是属于比特 A 和比特 B 的变量，这就要求他们必须是通过严格的单比特操作分别编码到它们各自所属的量子比特上的。

在本实验电路中，两个量子比特通过一个耦合电容 C_{m} 一直地耦合在一起，因而它们各自严格的单比特操作原则上不可能实现。但是，作为一种实验精度允许情况下的近似，这样的单比特操作还是可以近似地得以实现的。比如，在偏置条件 $E_C^{(1)} = E_C^{(2)} = E_J^{(k)} = 0$ 下，简单的脉冲 $E_J^{(j)} \neq 0$ 就可以实现如下操作：

$$\bar{U}_J^{(j)} = \hat{B}_j \otimes |0_k\rangle\langle 0_k| + \hat{B}_j^* \otimes |1_k\rangle\langle 1_k| + \xi_j \sigma_x^{(j)} \otimes \hat{I}_k \tag{8.2.11}$$

其中，$\hat{B}_j = \zeta_j|0_j\rangle\langle 0_j| + \zeta_j^*|1_j\rangle\langle 1_j|$, $\zeta_j = \cos(t\gamma_j/\hbar) - \mathrm{i}\cos\alpha_j \sin(t\gamma_j/\hbar)$, $\xi_j = \mathrm{i}\sin\alpha_j \sin(t\gamma_j/\hbar)$, $\cos\alpha_j = E_{12}/\gamma_j, \gamma_j = \sqrt{(E_{12})^2 + (E_J^{(j)}/2)^2}$。故而，对制备出来

的 Bell 态进行局域变量编码的过程可简单地由两步操作 $\prod_{j=1}^{2}\bar{U}_J^{(j)}$ 完成。相应地，电路的量子态变为：$|\psi'_\pm\rangle = \prod_{j=1}^{2}\bar{U}_J^{(j)}|\psi_\pm\rangle$。经过这一编码过程后，量子态的纠缠度将不再保持原来 Bell 态情况下的最大纠缠度 $C=1$，而是导致了一个改变量

$$\Delta C = 1-\sqrt{1-[\sin(2\alpha)(1-\cos(2\varphi_1+2\varphi_2))]^2} \tag{8.2.12}$$

其中，我们已经假定 $\alpha_1=\alpha_2=\alpha$ 和 $\varphi_j = 2\gamma_j t/\hbar,\ j=1,2$。显然 $\Delta C=0$ 将对应于理想的局域性编码。

经过上述局域变量的编码以后，我们对量子态 $|\psi'_\pm\rangle$ 施行两比特联合测量：探测量子比特的布居数，从而考察它们是否在相同的逻辑态：激发态 $|1\rangle$ 上或基态 $|0\rangle$ 上，最后得出与每组局域变量相对应的关联函数 $E(\alpha,\beta)$ 的值。在现在的超导电路中，所测量的是每个比特 (即 Cooper 对岛) 上的电荷量子态。测量的方法是通过一个合适电压偏置的单电子晶体管 (SET) 耦合于被测量子比特，从流过其电流的大小可以区分出岛上的电荷，即该比特所处的电荷量子态。比如，当对态 ρ 执行投影测量 $\hat{P}_j = |1_j\rangle\langle 1_j|$ 时，所得到的耗散电流 $I_c^{(j)} \propto \mathrm{Tr}(\rho\hat{P}_j)$。这样的一个投影测量等价于对 $\sigma_z^{(j)}$ 的测量，因为 $\sigma_z^{(j)} = (\hat{I}-\hat{P}_j)/2$。为了同时测出两个 Cooper 岛的电荷状态，我们需要施行的是 $P_{12}=\hat{P}_1\otimes\hat{P}_2$ 联合投影测量。理论上，两局域变量 φ_1 和 φ_2 的关联能够用算符 $\hat{P}_T = |11\rangle\langle 11| + |00\rangle\langle 00| - |10\rangle\langle 10| - |01\rangle\langle 01| = \sigma_z^{(1)}\otimes\sigma_z^{(2)}$ 的期望值

$$E(\varphi_1,\varphi_2) = \cos^2\alpha + \sin^2\alpha\cos(\varphi_1+\varphi_2) \tag{8.2.13}$$

来表示。实验上，上述所有操作步骤都能够在不同参数设置以一种可控的方式实现多次重复。结果，对于任何选定的经典变量 φ_1 和 φ_2 对的关联函数可由

$$E(\varphi_1,\varphi_2) = \frac{N_{\text{same}}(\varphi_1,\varphi_2) - N_{\text{diff}}(\varphi_1,\varphi_2)}{N_{\text{same}}(\varphi_1,\varphi_2) + N_{\text{diff}}(\varphi_1,\varphi_2)} \tag{8.2.14}$$

进行计算。这里 $N_{\text{same}}(\varphi_1,\varphi_2)$ $(N_{\text{diff}}(\varphi_1,\varphi_2))$ 是发现在两个量子比特处于相同 (不同) 逻辑态的事件数。有了这些测量得到的关联函数，就能对 Bell 不等式是否违背进行验证。

对典型局域变量集合：$\{\varphi_j,\varphi'_j\} = \{-\pi/8, 3\pi/8\}$ 和比特间耦合强度：$E_m = 4E_{12} = E_J$，$E_J/10$ 和 $E_J/100$，我们在图 8.2.2 中给出了关联 $E(\varphi_1,\varphi_2)$ 和局域变量编码过程中纠缠度的变化量 ΔC，以及 CHSH 函数 $f = |E(\varphi_1,\varphi_2) + E(\varphi'_1,\varphi_2) + E(\varphi_1,\varphi'_2) + E(\varphi'_1,\varphi'_2)|$。可以看到，比特间耦合越小纠缠度变化量 ΔC 也越小。对于非常弱的耦合系统，例如，$E_m/E_J = 0.1$(或 0.01)，以上的局域变量编码操作

可以被认为是相当理想的。忽略这些微小的局域性漏洞，我们看到 CHSH-Bell 不等式

$$|E(\varphi_1,\varphi_2)+E(\varphi_1^{'},\varphi_2)+E(\varphi_1,\varphi_2^{'})+E(\varphi_1^{'},\varphi_2^{'}|<2 \tag{8.2.15}$$

是被明显地违背了的。当然，这一验证方案的施行还受到一个物理条件的限制，即电路的量子退相干时间应当远大于操作与投影测量的完成时间。目前超导电荷量子比特的退相干时间还比较短，比如实验测得 $\sim 0.6\text{ns}$，故而直接用现在的超导电荷比特电路来验证 Bell 不等式还有相当的难度。尽管环境噪声影响和操作缺陷可以在统计平均计算关联函数 $E(\varphi_1,\varphi_2)$ 时得到一定程度的抑制，但更长退相干时间的要求，显然将在本质上增加实验的成功性。所以，实验上率先实现了 Bell 不等式的验证所用的是退相干时间更长的超导位相比特电路。

E_m	(φ_1,φ_2)	ΔC	$E(\varphi_1,\varphi_2)$	f
E_J	$(-\pi/8,-\pi/8)$	0.006 99	0.765 69	
	$(-\pi/8,3\pi/8)$	0.006 99	0.765 69	2.6627
	$(3\pi/8,-\pi/8)$	0.006 99	0.765 69	
	$(3\pi/8,3\pi/8)$	0.269 43	−0.365 69	
$E_J/10$	$(-\pi/8,-\pi/8)$	0.002 38	0.724 34	
	$(-\pi/8,3\pi/8)$	0.000 11	0.707 84	2.8264
	$(3\pi/8,-\pi/8)$	0.000 11	0.707 84	
	$(3\pi/8,3\pi/8)$	0.003 63	−0.702 85	
$E_J/100$	$(-\pi/8,-\pi/8)$	0.000 01	0.707 11	
	$(-\pi/8,3\pi/8)$	0.000 01	0.707 11	2.8284
	$(3\pi/8,-\pi/8)$	0.000 01	0.707 11	
	$(3\pi/8,3\pi/8)$	0.000 04	−0.707 06	

图 8.2.2 对于一定比特间耦合 E_m 参数，不同可控经典变量 φ_1 和 φ_2 组合所对应的纠缠度变化 ΔC，关联函数 $E(\phi_1,\phi_2)$ 和 CHSH 函数 f 的值

8.2.3 利用有效单比特操作进行有效局域变量编码的 Bell 不等式验证

在 Bell 不等式的验证过程中，只有严格的单比特操作才能实现理想的局域变量编码。对光子、囚禁离子及中子比特等而言，它们的单比特操作是很容易实现的，但比特间的相互作用需要通过特殊的设计才能实现。然而，正如上面我们所看到的那样，在固态量子电路 (如超导及量子点等) 中比特之间往往是通过一个固定不变 (如电容器或电感等) 的器件连接起来的，因而这种比特间的耦合一般是不可调节或开关的。在上面的验证方案中，我们设计了一个近似的单比特操作 (比特间的固有耦合仍保留) 来进行局域变量编码，这种近似程度的好坏由这一编码过程所导致的纠缠度的变化来度量。在本小节中，我们介绍如何利用一种称为“refocusing”的方法来克服这一困难，其基本思想是通过某种组合起来的逆演化过程来抵消比

特间固有耦合本身导致的量子态演化。比如，对于固定比特间耦合相互作用 $\kappa\sigma_1^z\sigma_2^z$ 所导致的两比特态演化 $U_I(t)=\exp(-\mathrm{i}t\kappa\sigma_1^z\sigma_2^z/\hbar)$，可以通过如下的组合演化：

$$U_I(t)\sigma_j^x U_I(t)\sigma_j^x=\exp(-\mathrm{i}t\kappa\sigma_1^z\sigma_2^z/\hbar)\exp(\mathrm{i}t\kappa\sigma_1^z\sigma_2^z/\hbar)=\hat{I},\quad j=1,2 \tag{8.2.16}$$

来抵消。这一方法在核磁共振技术中常被用来消除核自旋之间不可调相互作用的影响，事实上，在核磁共振系统中第 i 个核自旋和第 j 个核自旋之间的耦合常数 J_{ij} 比起它们之间本征频率差 $\Delta\omega_{ij}=|\omega_j-\omega_i|$ 来说要小得多，比如，$J_{ij}/\Delta\omega_{ij}\lesssim 10^{-4}$。所以，“refocusing” 操作所需要的关键单比特 σ_j^x 旋转很容易通过对单个核自旋施行一个强的共振脉冲来实现。但在现在的超导量子电路中，比特间的相互作用 E_{12} 和单比特旋转操作强度 E_J 相比，大概只小一个量级，并且两个比特之间的本征频率几乎是相等的。所以，直接对某个单比特施加一个与其本征频率共振的脉冲难以实现所需要的 σ_j^x 操作。为此，我们采用“动力学去耦”办法将能在超导电路中选定的某个量子比特有效地实现所需的单比特操作。

我们考虑如图 8.2.3 所示更接近于实验实际情况的超导量子电路。假定，每个 Cooper 对岛都偏置于其简并点附近，即 $n_{g,j}=(C_{g,j}V_{g,j}+C_{p,j}V_p)/2e\sim 1/2$，故而整个电路的量子动力学演化将被控制在其四个最低电荷态：$|00\rangle,|10\rangle,|01\rangle$ 和 $|11\rangle$ 空间所展开的子空间里。这样，这个电路的 Hamilton 量就可以简单地写为

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\sum_{j=1,2}^{3}[E_C^{(j)}\sigma_z^{(j)}-E_J^{(j)}\sigma_x^{(j)}]+E_{12}\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)} \tag{8.2.17}$$

其中，$E_{12}=E_m/4,\ E_m=4e^2C_m/C_{\sum}$ 是量子比特间的有效耦合强度。有效电荷能量 $E_C=E_{C_j}(-1/2+n_{g_j})+E_m(-1/4+n_{g_k}/2),j,k=1,2,$ 其中，$E_{C_j}=4e^2C_{\sum_k}/C_{\sum}$。超导量子干涉仪有效 Josephson 能量是 $E_J^{(j)}=2\varepsilon_J^{(j)}\cos(\pi\Phi_j/\Phi_0)$，其中 $\varepsilon_J^{(j)}$ 是单结 Josephson 能量。上面的 $C_{\sum}=C_{\sum_1}C_{\sum_2}-C_m^2$，$C_{\sum_j}$ 是连接第 j 个盒子所有电容的和。赝自旋算符具有如下的定义形式：$\sigma_z^{(j)}=|0_j\rangle\langle 0_j|-|1_j\rangle\langle 1_j|$ 和 $\sigma_x^{(j)}=|0_j\rangle\langle 1_j|+|1_j\rangle\langle 0_j|$。

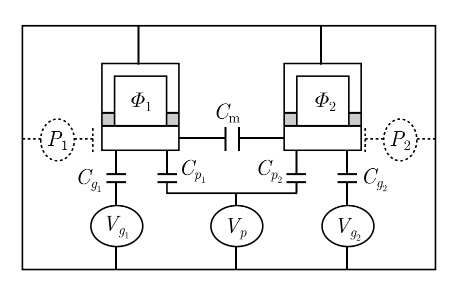


图 8.2.3　两个电荷量子比特的电容性耦合

两个 Cooper 对岛 (量子比特) 的量子态是通过控制偏置门电压 $V_{j_1}(j=1,2,3)$. V_{j_2} 和外置磁通 Φ_1、Φ_2 (影响 SQUID 回路) 进行操作的。P_1 和 P_2(虚线部分) 用于读出最终的量子比特态

为了有效实现单比特操作 σ_j^x，我们使电路工作于其简并点处：$n_{g_1}=n_{g_1}=0.5$，从而 $E_C^{(1)}=E_C^{(2)}=0$；并且 $\Phi_j=0$，$\Phi_k=\Phi_0/2$，$k\neq j$，使得 $E_J^{(j)}=2\varepsilon_J^{(j)}\neq 0$，$E_J^{(k)}$=0。在这种情况下，电路的 Hamilton 量变为

$$\hat{H}_I=-\varepsilon_J^{(j)}\sigma_x^{(j)}-E_{12}\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)} \tag{8.2.18}$$

显然，其对应的含时演化算符为

$$\hat{U}_I(t)=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\hat{H}_I\right)=\exp\left[\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\varepsilon_J^{(j)}\sigma_j^x\right]\hat{U}_{\text{int}}(t) \tag{8.2.19}$$

其中，算符 $\hat{U}_{\text{int}}(t)$ 通过如下方程定义，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{U}_{\text{int}}(t)}{\partial t}=\hat{H}_{\text{int}}(t)\hat{U}_{\text{int}}(t),\quad \hat{H}_{\text{int}}(t)=E_{12}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\varepsilon_J^{(j)}\sigma_x^{(j)}\right]\sigma_z^1\sigma_z^2\exp\left[\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\varepsilon_J^{(j)}\sigma_x^{(j)}\right] \tag{8.2.20}$$

由于 $\zeta_j=E_{12}/(2\varepsilon_J^{(j)})\ll 1$ (例如在实验中 $\zeta_j\lesssim 1/4$)，我们可以做如下的微扰展开：

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\text{int}}(t)&=1+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int^t \mathrm{d}t'\hat{H}_{\text{int}}(t')+\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int^t\int^{t'}\mathrm{d}t'\mathrm{d}t''\hat{H}_{\text{int}}(t')\hat{H}_{\text{int}}(t'')+\cdots\\&=1-\left(\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\right)\frac{E_{12}^2}{2\varepsilon_J^{(j)}}\sigma_x^{(j)}\otimes I^k+\hat{O}(\zeta_j^2)\end{aligned} \tag{8.2.21}$$

忽略掉 ζ_j 的高次项，系统的 Hamilton 量就可以简化为

$$\hat{H}_{\text{eff}}=-\left[\varepsilon_J^j+\frac{E_{12}^2}{2\varepsilon_J^{(j)}}\right]\sigma_x^{(j)}\otimes I^k \tag{8.2.22}$$

这就是在一个有固定耦合量子电路中实现有效单比特操作所需要的 Hamilton 量。在以上的推导中，一次展开项：$\hat{U}_{\text{int}}^{(1)}(t)=(-\mathrm{i}t/\hbar)\int^t\mathrm{d}t'\hat{H}_{\text{int}}(t')$ 对整个电路时间演化实际上影响很小，是一个和 ζ_j^2 同数量级的微弱效应，故而可有效地忽略。显然，在以上的“动力学去耦”近似中，比特之间的恒定耦合项被作为一种 Josephson 能量的平移效应吸纳进单比特演化中去了。有效 Hamilton 量 H_{eff} 所对应的就是如下的单比特演化：

$$\hat{R}_x^{(j)}=\exp[\mathrm{i}\varphi_j\sigma_x^{(j)}],\quad \varphi_j=\frac{\varepsilon_J^{(j)}t}{\hbar}(1+2\zeta_j^2) \tag{8.2.23}$$

通过合适地设置演化时间，使 $\cos\varphi_j=0$，则此演化就成为 “refocusing” 操作组合中所需要的单比特 $\sigma_x^{(j)}$ 旋转。

以上的“动力学去耦”的有效性可以通过比较未近似下 Hamilton 量演化的差异来验证，即在同样的初态情况下，比较由 $\hat{H}_{\text{eff}}$ 导致的含时演化

$$\hat{U}_{\text{appr}}(t) = R_x^j(\varphi_j) \otimes I^k \tag{8.2.24}$$

与不做任何近似下得到的精确时间演化

$$\begin{aligned}\hat{U_{\text{ex}}}(t) = \exp(-\mathrm{i}t\hat{H}_I/\hbar) &= A(t)\sigma_x^{(j)} \otimes I^k + B(t)(|0_j0_k\rangle\langle 0_j0_k| \\ &+ |1_j1_k\rangle\langle 1_j1_k| + B^*(t)(|1_j0_k\rangle\langle 1_j0_k + |0_j1_k\rangle\langle 0_j1_k|)\end{aligned} \tag{8.2.25}$$

之间的差异。这里

$$A(t) = \mathrm{i}\rho_j(t), \quad B(t) = [1-\rho_j^2(t)]^{1/2}\exp[-\mathrm{i}\zeta_j(t)] \tag{8.2.26}$$

其中，$\rho_j(t) = \nu_j^{-1}\sin(\varepsilon_J^{(j)}\nu_j t/\hbar), \nu_j = [1+(E_{12}/\varepsilon_J^{(j)})^2]^{1/2}, \xi_j(t) = \arctan[2\zeta_j\nu_j^{-1}\tan(\varepsilon_J^{(j)}\nu_j t/\hbar)]$。图 8.2.4 给出了基于 $\hat{U}_{\text{appr}}(t)$(实线) 和 $\hat{U}_{\text{ex}}(t)$(虚线) 经过相同时间的演化后，$|1_j0_k\rangle \leftrightarrow |0_j0_k\rangle$ 跃迁几率的比较。可见两者符合得相当好，当耦合强度分别等于 $\zeta_j = 1/8$ 和 $\zeta_j = 1/10$ 时，两者的最大差异小于 0.06 和 0.04。

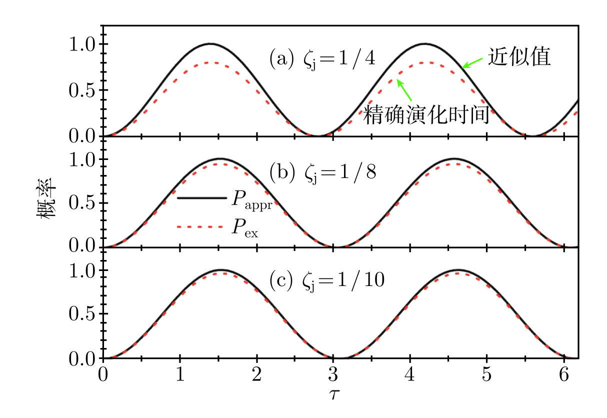


图 8.2.4　分别基于近似和精确时间演化，经过 $\tau = \varepsilon_J^{(j)}t/\hbar$ 时间后，$|1_j0_k\rangle \leftrightarrows |0_j0_k\rangle$ 的几率：P_{appr}(实线) 和 P_{ex}(点线)。显然，随着比特间耦合 ζ_j 减小，它们间的差异也减小

类似地，若系统处于远小于简并点 (比如 $n_{g_j} < 0.25$)，相对于电荷能 E_C^j 来说，E_J^j 和固定耦合强度 E_{12} 都是微扰小量。这样电路的 Hamilton 量就可以有效地近似为

$$\hat{H}_2 = \sum_{j=1,2} E_j\sigma_z^{(j)} - E_{12}\sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)} \tag{8.2.27}$$

其中，$E_j = E_C^{(j)}[1+\varsigma_j^2/(1-\varsigma_{12}^2)]$ 和 $\varsigma_j = E_j^{(j)}/(2E_C^{(j)})$，$\varsigma_{12} = E_{12}/E_C^{(j)}$。它所对应的演化是

$$R_z^{12} = \exp[-\mathrm{i}\chi_{12}\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)}] \otimes \prod_{j=1,2} \exp[-\mathrm{i}\chi_j\sigma_z^{(j)}] \tag{8.2.28}$$

其中，$\chi = \{\chi_j, \chi_{12}\}$ 和 $\chi_j = E_j t/\hbar$, $\chi_{12} = E_{12}t/\hbar$。对于最简单情况即 $E_J^{(j)} = 0$, $\varsigma_j = 0$，我们可得到 $E_j = E_C^{(j)}$。进而，按上述的 “refocusing” 操作组合就可得另一个单比特操作

$$R_z^{(j)}(\phi_j) = [R_z^{(12)}(\chi)\sigma_x^{(k)}]^2 = \exp[\phi_j\sigma_z^{(j)}] \tag{8.2.29}$$

其中，$\phi_j = 2\chi_j$。注意到，这个操作的位相反转形式 $R_z^{(j)}(-\phi_j) = \exp[\phi_j\sigma_z^{(j)}]$ 可通过控制外置门电压来改变 E_j 而获得。

理论上，由于单比特操作 $R_z^{(j)}(\phi_j)$ 和单比特操作 $R_x^{(j)}(\varphi_j)$ 是不对易的，因此它们的组合能构成任意的单比特操作。例如，在 Bell 不等式验证中用到的局域变量编码操作就可以按如下方式：

$$\begin{aligned} R_j(\theta_j) &= R_z^{(j)}(\theta_j/2)R_x^{(j)}(\pi/4)R_z^{(j)}(-\theta_j/2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i}\exp(i\theta_j) \\ -\mathrm{i}\exp(-i\theta_j) & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{8.2.30}$$

实现。至此，我们建立了一种更为有效的局域变量编码方案，预计由此实现的 Bell 不等式验证的精度会更高一些。

8.3 在三比特超导电路中确定性地验证 Bell 定理

在以上通过不等式来验证 Bell 定理的方案中，所涉及的物理可观测量是两个局域变量之间的非局域关联 $E(\alpha, \beta)$。但这个关联函数是一个需要做多次测量再求统计平均才能得到的物理量，因而 Bell 定理验证的有效性只具有统计意义。1990 年 Greenberger-Horne-Zeilinger 指出，利用三粒子关联实验可以确定性地对 Bell 定理进行验证。这一论断已经被最近的三光子纠缠态实验所证实。我们的问题是，是否能利用超导量子电路在宏观水平上同样地对这一确定性判据进行验证呢？为此我们必须先制备一个宏观比特的三体纠缠 GHZ 态，然后进行一些组合测量来进行检验。

8.3.1 超导电路中的宏观 GHZ 态制备及证实

我们考虑如图 8.3.1 所示的三比特超导电路，它仅仅是在已有实验电路的基础上增加一个比特。这里三个 SQUID 结构的具有可控 Josephson 能量的超导 Cooper 对岛构成了 Josephson 三量子比特，它们之间的距离是在微米量级并通过两个电容

耦合起来。同样，假定每个 Cooper 对岛都被偏置在其简并点附近，因而整个电路的动力学演化就可以由如下简化的 Hamilton 量：

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}[E_C^{(j)}\sigma_x^{(j)}-E_J^{(j)}\sigma_x^{(j)}]+\sum_{j=1}^{2}K_{j,j+1}\sigma_z^{(j)}\sigma_z^{(j+1)} \tag{8.3.1}$$

来决定。这里 $E_J^{(j)}=2\varepsilon_J^{(j)}\cos(\pi\varPhi_j/\varPhi_0)$ 为第 j 个量子比特的有效 Josephson 能，$E_C^{(j)}=2e^2[\tilde{C}_{\sum_j}^{-1}(2n_g-1)+\sum\limits_{k\neq j}\tilde{C}_{j,k}^{-1}(2n_{gk}-1)]$ 表示第 j 个量子比特的有效电荷能，而 $K_{j,j+1}=e^2/\tilde{C}_{j,j+1}^{-1}$ 则表示两个紧邻量子比特间的相互作用能；其中 $n_{gj}=C_{gj}V_j/(2e)\sim 0.5$，并且 $\tilde{C}_{\sum_1}=C_{\sum_1}/(1+C_{12}^2C_{\sum_3}/\tilde{C}),\tilde{C}_{\sum_2}=\tilde{C}/(C_{\sum_1}C_{\sum_3}),\tilde{C}_{\sum_3}=C_{\sum_3}/(1+C_{23}^2C_{\sum_1}/\tilde{C}),\tilde{C_{12}}=\tilde{C}/(C_{\sum_3}C_{12},\tilde{C_{23}}=\tilde{C}/(C_{\sum_1}C_{23}),\tilde{C_{13}}=\tilde{C}/(C_{12}C_{23})$，以及 $\tilde{C}=\prod\limits_{j=1}^{3}C_{\sum_j}-C_{12}^2C_{\sum_3}-C_{23}^2C_{\sum_1}$。这里，赝自旋算符定义为：$\sigma_z^{(j)}=|0_j\rangle\langle 0_j|-|1_j\rangle\langle 1_j|,\sigma_x^{(j)}=|0_j\rangle\langle 1_j|+|1_j\rangle\langle 0_j|$。注意，第 j 个量子比特的电荷能不仅仅依赖于其所偏置的第 j 个门电压，而且与另外两个 Cooper 对岛的偏置电压有关。相对最近邻的量子比特之间的耦合强度 $K_{j,j+1}$，非最近邻 (即第一个和第三个量子比特之间的 $K_{1,3}$) 相互作用的强度是很弱的，故而可以忽略掉。事实上，由典型的实验参数：$C_J\sim 600aF,C_m\sim 30aF,C_g=0.6aF$, 所以我们可以得到 $K_{13}/K_{12}=K_{13}/K_{23}<C_m/C_J=0.05$ 和 $K_{12}/2\varepsilon_j\sim 1/4$。

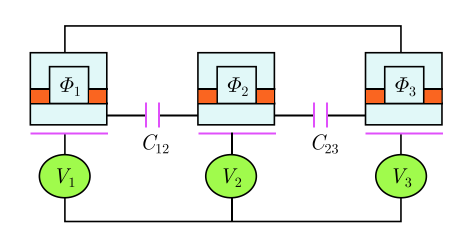


图 8.3.1 三个通过电容耦合的 SQUID 型电荷量子比特。三个 Cooper 对岛 (量子比特) 的量子态是通过控制偏置门电压 $V_j(j=1,2,3)$ 外置磁通 $\varPhi_j$(影响 SQUID 回路) 来进行操作的

正如上面的数值估计所看到的，近邻比特之间的电容耦合 $K_{j,j+1}$ 是比较强的，所以不可能实现任何的单比特操作。当然，一旦知道了电路所处的状态，则仍有可能在保持其他的量子比特不变情况下，对选定的量子比特进行某种演化操作。比如，从电路初始时刻 (这时 $E_C^{(j)}=E_J^{(j)}\equiv 0,\ j=1,2,3$) 的基态 $|\psi(0)\rangle=|000\rangle$ 出发，通过以下的三步脉冲过程：

$$\begin{aligned}|\psi(0)\rangle=|000\rangle &\xrightarrow{\hat{U}_2(t_2)}\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle\pm \mathrm{i}|010\rangle)\xrightarrow{\hat{U}_1(t_1)}\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle\mp \mathrm{i}|110\rangle)\\ &\xrightarrow{\hat{U}_3(t_3)}\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle\pm \mathrm{i}|111\rangle)=|\psi_{\rm GHZ}^{\pm}\rangle\end{aligned} \tag{8.3.2}$$

我们就能得到所期望的 GHZ 态。这里，第一步脉冲用于实现第一个演化 $\hat{U}_2(t_2)$：作用是使第二个量子比特的两个逻辑态叠加。这个操作是通过突然施加第二个量子比特的 Josephson 能 $E_J^{(2)} \neq 0$，并且将其电荷能设为 $E_C^{(2)} = -2(K_{12} + K_{23})$ 而实现的。这个脉冲的时间长度 t_2 应满足条件：$\sin[E_J^{(2)} t_2/(2\hbar)] = \pm 1/\sqrt{2}$。同理，第二 (或第三) 演化 $\hat{U}_1(t_1)\hat{U}_3(t_3)$ 是通过设置施加第一个 (或第三个) 的量子比特 Josephson 能来实现的，相应地要求电荷能设定为 $E_C^1 = 2K_{12}$(或 $E_C^3 = 2K_{23}$)。还有，脉冲的长度应满足条件：$\sin[E_J^{(j)} t_j/(2\hbar)] = 1$ 和 $\cos[\gamma_j t_j/(2\hbar)] = 1$，其中 $\gamma_j = \sqrt{(2K_{j2})^2 + (E_J^j)^2}$，$j = 1, 3$。这样设置的目的是达到选定量子比特逻辑态的有条件反转，比如，若第二个量子比特处在 $|1\rangle$ 态则反转；若第二个量子比特处在 $|0\rangle$ 态则将保持不变。

至此，我们在理论上是给出了如何在超导量子电路中制备宏观 GHZ 态。但如何证实以上所制备的就是我们想要制备的宏观量子 GHZ 态呢？这还需要一个实验上的确认过程。所幸的是，由于所制备的 GHZ 态本身也是空闲电路 (即对此电路没有进行任何操作，故而其动力学可用 Hamilton 量 $\hat{H} = \sum_{j=1,2} K_{j,j+1}\sigma_z^{(j)}\sigma_z^{(j+1)}$) 的本征态描述，所以至少在理论上它的寿命相对长。这就为证实它的制备提供了实验上的可能性。一般来说，要完全表征一个量子态的做法是在实验上将密度矩阵的每个矩阵元都测定出来，然后将密度矩阵整体地重构出来，这就是通常所说的量子态的 “Tomographic” 重构。然而，这样的重构是以很多种的量子测量为基础的，而且，每种测量也还需要重复多次才能确定某一个或几个矩阵元中的参数。例如，要重构一个三比特的量子态，需要确定的矩阵元数目是 $8 \times 8 = 64$，而每个矩阵元又都是复数，故这 64 个矩阵元共有 128 个待定的实参数。如果用通常单值投影测量的方法来确定这些参数的话，需要的投影测量的种类及次数将是一个非常大的数目。最重要的是，这些重构所需要的测量都是一些破坏性的投影测量，所以需要制备许许多多这一需要重构态的备份。从这个意义上说，虽然量子态的 “Tomographic” 重构是表征一个量子态的最精确方法，但因此对量子态制备及测量操作等的要求也相应地复杂得多。有鉴于此，我们采用如下一种简便得多的办法来实现以上所需要的 GHZ 态证实，所需的操作步骤如下。

1) 检验态的叠加性

首先要证实所制备的量子态都为两个计算基矢态 $|000\rangle$ 和 $|111\rangle$ 的叠加。为此，我们同时对电路中三个 Cooper 对岛的电荷量子态进行独立的投影测量。这里，假定每个投影探测器都能明确地区分岛上的 Cooper 对 $|0\rangle$ 态 (比如探测器无电流流过) 和 $|1\rangle$ 态 (比如探测器中有电流流过)。所以如果电路确实是被制备在以上所期望的 $|000\rangle$ 和 $|111\rangle$ 的叠加态上，那么三个探测器的响应只有两种可能：要么都有电流流过 (说明电路被塌缩到 $|111\rangle$ 态)，要么都没有电流流过 (对应于电路被塌缩

到 $|000\rangle$ 态)。注意到这一测量结果只是证实 GHZ 态的必要条件，而不充分。原因是，态 $|000\rangle$ 和态 $|111\rangle$ 的非相干叠加 (即统计混合态) 也能导致同样的测量结果。

2) 验证叠加的相干性

第二步是为了验证以上所制备的态确实就是 $|111\rangle$ 和 $|000\rangle$ 相干叠加，而不是它们的统计混合。我们考虑以下的操作次序：

$$|\psi^+_{\text{GHZ}}\rangle \xrightarrow{\tilde{U}_2} \frac{1}{2}(|000\rangle - |101\rangle + \mathrm{i}|010\rangle + \mathrm{i}|111\rangle)\rangle \xrightarrow{\hat{P}_2} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1 0_3\rangle + |1_1 1_3\rangle)\rangle$$
$$\xrightarrow{\tilde{U}_1 \otimes \tilde{U}_3} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1 1_3\rangle + |1_1 0_3\rangle) \tag{8.3.3}$$

其中，$\hat{P}_2 = |1_2\rangle\langle 1_2|$ 表示的是对第二个量子比特进行的投影测量。如果此前我们所制备的态是 GHZ 态的话，那么当我们最后对剩下的第一和第三个量子比特同时进行独立的投影测量时一定会得到这样的一个结果：一个探测器有电流，而另一个探测器则没有电流。这是相干叠加的必然结果，如果最后的测量结果不是这样的，那就说明此前制备的是态 $|000\rangle$ 和态 $|111\rangle$ 的非相干叠加，而不是我们所期望的相干叠加情形。

现在剩下的问题是，如何实现以上验证过程中所需的单比特操作 $\tilde{U}_j = \exp[\mathrm{i}\pi\sigma_x^{(j)}/4]$, $j = 1,2,3$，即在对第 j 个比特施行此操作时，其他的两个量子比特保持不变。在现在这种耦合不可调的固态电路中实现这一操作并不容易做到。首先，为了实现对第二个量子比特的演化操作 $\tilde{U}_2$，我们仅对第二个量子比特施加 Josephson 能，使得 $E_J^2 = 2\varepsilon_J^2 \neq 0$，这时电路将在 Hamilton 量

$$\hat{H}_2 = -\varepsilon_J^{(2)}\sigma_x^{(2)} + K_{12}\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)} + K_{23}\sigma_z^{(2)}\sigma_z^{(3)} \tag{8.3.4}$$

的作用下演化。因为，$\xi_{12} = K_{12}/(2\varepsilon_J^2) < 1, \xi_{23} = K_{23}/(2\varepsilon_J^2) < 1$(例如 $\lesssim 1/4$ 是典型的实验数据)，所以这里我们可以把 $\hat{H}_2$ 中的第二和第三项看作第一项的微扰。因此，在忽略掉微扰小量 ξ_{12}, ξ_{23} 二阶及以上小量的情况下，按上节同样的做法可以将 $\hat{H}_2$ 有效地近似为

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(2)} = -\varepsilon_J^2[1 + 2\zeta_{12}^2 + 2\zeta_{23}^2 + 4\zeta_{12}^2\zeta_{23}^2\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(3)}]\sigma_x^{(2)} \tag{8.3.5}$$

从形式上看，在这个式子中第一个和第三个量子比特仍然会对第二个比特的演化造成影响。但幸运的是，对 GHZ 态而言第一个和第三个量子比特的取值总是一样的，故而上式中 $\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(3)} \equiv 1$。所以，只要将演化时间设置为 $\tau_2 = \hbar\pi/4\varepsilon_J^2[1+2\zeta_{12}^2+2\zeta_{23}^2+4\zeta_{12}^2\zeta_{23}^2]$，那么所需要的单比特操作算符 $\tilde{U}_2 = \exp(-\mathrm{i}\hat{H}_{\text{eff}}^2\tau_2/\hbar) = \exp(\mathrm{i}\pi\sigma_x^{(2)}/4)$ 就可以有效地实现。类似地，通过对第一和第三个量子比特同时施加 Josephson 能，可以将电路的 Hamilton 量写为

$$\hat{H}_{13} = \sum_{j=1,3}[-\varepsilon_J^{(j)}\sigma_x^{(j)} + K_{j2}\sigma_z^{(j)}\sigma_z^2] \tag{8.3.6}$$

再次忽略掉 $\xi_{j2} = K_{j2}/(2\varepsilon_J^j) < 1$, $j = 1, 3$ 的高次项，可得如下的有效 Hamilton 量：

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(13)} = -\sum_{j=1,3} \varepsilon_J^{(j)} \left[1 + 2\zeta_{j2}^{(2)} \sigma_z^{(2)}\right] \sigma_x^{(j)} \tag{8.3.7}$$

这里包含着与第二个量子比特状态有关的 Josephson 能修正项：$\triangle E = 4\varepsilon_J^{(j)} \zeta_{j2}^2 \sigma_z^{(2)}$。再一次比较凑巧的是，在经历了投影测量之后的第二个量子比特，其量子态必定已经塌缩到了其基态 $|0\rangle$。投影探测的结果就是，如果岛上有电荷即处于态 $|1_2\rangle$ 的话，它们也将通过隧穿过程进入到所连接的单电子探测系统中形成电流，故而岛上的电荷态必定会塌缩到电荷为零的 $|0\rangle$ 态。所以有效 Hamilton 量 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(13)}$ 导致的演化就是 $\hat{U_{13}}(\tau_{13}) = \exp(-\mathrm{i}\hat{H}_{\text{eff}}^{(13)}\tau_{13}/\hbar) = \prod\limits_{j=1,3} \exp\{\mathrm{i}\tau_{13}[\varepsilon_J^{(j)}(1+2\zeta_{j2}^2)]/\hbar\}$。显然，如果演化时间 τ_{13} 满足条件：$\tau_{13}[\varepsilon_J^{(j)}(1+2\zeta_{j2}^2)]/\hbar = \pi/4$，那么就得到我们所需要的两个同时进行的单比特操作：$\prod\limits_{j=1,3} \tilde{U}_j = \prod\limits_{j=1,3} \exp(\mathrm{i}\pi\sigma_x^{(j)}/4)$。

8.3.2 Bell 定理的确定性验证

有了以上制备并经过证实了的 GHZ 态，下面关于无须验证 Bell 不等式来验证 Bell 定理的方法就相对比较标准了，例如可参见文献 Scully 和 Zubairy 在 1997 年所著*Quantum Optics*的第 18 章。现在我们的出发点是，有一个已经制备在三体纠缠 GHZ 态

$$|\psi_{\text{GHZ}}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle - \mathrm{i}|111\rangle) \tag{8.3.8}$$

上的超导量子电路，我们将讨论如何对量子力学中的非局域性进行确定性而非统计性的验证。即设计一个实验方案对根据量子力学原理给出的预言和由隐变量 (经典决定性) 理论所推演出来的结果之间的矛盾进行“裁判”，这样的实验并不需要像验证 Bell 不等式一样需要进行多次量子测量。

首先我们看看，根据量子力学我们会得到什么是实验上可以明确验证的结果。第一，容易验证，电路的量子态 $|\psi_{\text{GHZ}}^-\rangle$ 是组合算符集合 $\hat{O} = \{\sigma_y^{(1)}\sigma_x^{(2)}\sigma_x^{(3)}, \sigma_x^{(1)}\sigma_y^{(2)}\sigma_x^{(3)}, \sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}\sigma_y^{(3)}\}$ 中每一个的本征值为 +1 的本征态。这就意味着，例如，如果“同时”对“宏观粒子”(即微米量子的 Cooper 对岛)2, 3 分别施行测量 $\sigma_x^{(2)}, \sigma_x^{(3)}$ 时得到的结果都是 +1 (它们都被投影到了同一个本征值的本征态上)，那么第三个“宏观粒子”的 $\sigma_y^{(1)}$ 不用测也知道它的取值必定是“+1”(即必定塌缩到了其本征态为 +1 的本征态 $|\tilde{+}\rangle$ 上了)。这样，由于它与第二、第三个粒子并不在一个地方 (有数微米远)，但只要它们单个单个的测量是足够快的 (即它们之间的信息还来不及传递过去，所有的测量都完成了)，则关于第一个“宏观粒子”所作的预言必定是一个“超距”作用的结果，这正是一个 EPR 型佯谬的又一种表现形式！第二，可以验证

所制备的 GHZ 态是组合算符 $\hat{Q} = \prod_{j=1}^{3} \sigma_y^{(j)}$ 的本征值为 -1 的本征态，这与算符公式

$$\sigma_y^{(1)}\sigma_x^{(2)}\sigma_x^{(3)}\,\sigma_x^{(1)}\sigma_y^{(2)}\sigma_x^{(3)}\,\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}\sigma_y^{(3)} = -\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\sigma_y^{(3)} \tag{8.3.9}$$

的推论是一致的。式 (8.3.9) 中我们利用了算符关系：$\sigma_x^{(j)}\sigma_y^{(j)} = -\sigma_y^{(j)}\sigma_x^{(j)}$。这说明，如果我们进行组合测量的话，那么三个探测器所得的结果 $m_1^y, m_2^{(y)}, m_3^{(y)}$ 应当满足关系：$m_1^y m_2^{(y)} m_3^{(y)} = -1$。

然后我们再分析隐变量的存在对这个超导电路意味着什么。因为这个理论隐含着一个这样的假定，即如果能够精确预测一个物理量的取值，那么一定对应于一个“物理实在”的元素。比如，对 $\sigma_x^{(j)}$ 的测量，由于只能得到 ± 1，所以与此相对应必定存在一个“物理实在”的元素 $m_x^{(j)} = \pm 1$。因此，如果我们对以上的超导电路 (制备于量子态 $|\psi_{\rm GHZ}^-\rangle$) 进行组合测量：$\{\sigma_y^{(1)}\sigma_x^{(2)}\sigma_x^{(3)}, \sigma_x^{(1)}\sigma_y^{(2)}\sigma_x^{(3)}, \sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}\sigma_y^{(3)}\}$，那么所得到的物理实在元素应满足如下的关系：

$$m_y^{(1)}m_x^{(2)}m_x^{(3)} = +1, \quad m_x^{(1)}m_y^{(2)}m_x^{(3)} = +1, \quad m_x^{(1)}m_x^{(2)}m_y^{(3)} = +1 \tag{8.3.10}$$

由此，我们得到

$$m_y^{(1)}m_x^{(2)}m_x^{(3)}\,m_x^{(1)}m_y^{(2)}m_x^{(3)}\,m_x^{(1)}m_x^{(2)}m_y^{(3)} = m_y^{(1)}m_y^{(2)}m_y^{(3)} = 1 \tag{8.3.11}$$

其中，我们利用了经典变量的性质 $m_y^{(j)}m_x^{(j)} = m_x^{(j)}m_y^{(j)}, (m_x^{(j)})^2 = (m_x^{(j)})^2 = 1$。这个推论意味着，如果我们对电路进行组合测量 $\hat{Q}$ 的话，三个探测器所得到的结果应当满足关系：$m_y^{(1)}m_y^{(2)}m_y^{(3)} = 1$。显然这是一个与量子力学预言相违背的结果。

可见，要在制备于宏观 GHZ 量子态的超导电路中实现对上述 Bell 定理进行确定性的实验验证，就包括以下的两个操作步骤：第一，施行组合测量 $\hat{O}$ 以确定某种“物理实在元素”；第二，施行组合测量 $\hat{Q}$ 以检验关系 $m_y^{(1)}m_y^{(2)}m_y^{(3)} = 1$ 是否满足，如果满足则说明确实存在某种“物理实在”元素，即隐变量；反之则证明现在的量子力学理论体系是完备的，无须引入隐变量描述。因而，现在剩下的问题是如何在电路中实现 $\sigma_x^{(j)}$ 和 $\sigma_y^{(j)}$ 测量了。这样的测量在光学系统中可以通过对单个探测器进行某种旋转操作，比如用不同的检偏片可以对不同的光子偏振方向进行检测；但在现在的固态电路中，能够直接实现的量子测量往往是对 σ_z 的测量。这样就需要另外的操作，如用 Hadamard 门 $\hat{S}_x = (\sigma_z + \sigma_x)$ 和归一化转换 $\hat{S}_y = [(1+{\rm i})\hat{I} + (1-{\rm i})\sum_\alpha \sigma_\alpha]/(2\sqrt{2})$, 从而将 σ_x 或者 σ_y 的本征态分别转换到 σ_z 所对应的本征态来探测。

虽然也面临像退相干问题等其他量子态工程一样遇到的困难，我们提出 GHZ 关联的产生和 Bell 定理的验证在实验仍然是有可能实现的。首先，我们方案的电

路部分制作应该不是难题：它仅仅是在现存的两 Cooper 对岛超导量子电路中增加了一个量子比特的结构而已；而且，为了实现快速的量子操作，快速打开或关闭 Josephson 能及电荷能在实验上都是可能的。比如，假如一个超导量子干涉回路的尺度为 10μm，那么要在 10^{-10}s 内就可以改变大约一半的磁通量子，而目前的实验技术是可以达到所要求的大致为 10^5T/s 的磁场扫描速率。最后的一个挑战是要求同时对多个量子比特进行快速的读出，这也几乎是所有量子算法和量子计算的物理实现中所共同面临的任务。原则上，为了避免量子比特之间在读取时的相互串扰，要求读出时间 $t_{\rm m}$ 要比它们之间相互通信的特征时间 $t_{\rm c} \sim \hbar/K_{j,j+1}$ 明显地小。这些要求在现在超导位相量子比特电路中已经能够达到，其中耦合能量 $K \sim 80$MHz，而 $t_{\rm m} \sim 1$ns 和 $t_{\rm c} \sim 1$ns；而对于现在的超导电荷量子比特电路来说，这里比特间耦合能量 $K \sim 3$GHz，就要求读出脉冲的持续时间不应该超过数十皮秒。注意到单电子探测器 (SET) 的响应时间通常要数百纳秒，所以就要求比特间的耦合要低到数百千赫兹的才行。

参 考 文 献

Bell J S. 1966. On the problem of hidden variables in quantum mechanics. Rev. Mod. Phys., 38: 447

Bohm D. 1951. Quantum Theory. Prentice-Hall, Inc., New York

Bohm D. 1952. A suggested interpretation of the quantum theory in terms of “hidden” variables. I Phys. Rev., 85: 166; 180

Clauser J F, Horne M A, Shimony A, et al. 1969. Proposed experiment to test local hidden-variable theories. Phys. Rev. Lett., 23: 880

Cory D G, Fahmy A F, Havel T F. 1997. Quantum adabatic algorithm for factorization and its experimental test, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., 94: 1634

D’Ariano G M, Matteo G A, Massimiliano F S. Quantum tomography. arXiv:quant-ph/0302028

Einstein A, Podolsky B, Rosen N. 1935. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? Phys. Rev., 47: 777

Greenberger D M, Horne M, Shimony A, et al. 1990. Bell’s theorem without inequalities, Am. J. Phys., 58: 1131

Markus Ansmann et al. 2009. Violation of Bell’s inequality in Jesephson phase qubits, Nature, 461: 504

Nakamura Y, et al. 1999. Coherent control of macroscopic quantum states in a single-Cooper-pair box. Nature, 398: 786

Pan J W, et al. 2000. Experimental test of quantum nonlocality in three-photon Greenberger-Horne-Zellinger entanglement, Nature, 403: 515

Pashkin Y A, et al. 2003. Quantum oscillations in two coupled charge qubits. Nature, 421: 823

Rowe M A, et al. 2001. Experimental violation of a Bell's inequality with efficent detection. Nature, 409: 791

Scully M O, Zubairy M S. 1997. Quantum Optics. Cambridge University Press, Chap. 18

Wei L F, Liu Y X, Franco Nori. 2005. Testing Bell's inequality in a constantly coupled Josephson circuit by effective single-qubit operations. Phys. Rev., B72: 104516

Wei L F, Liu Y X, Franco Nori. 2006. Generation and Control of Greenberger-Horne-Zeilinger Entanglement in Superconducting Circuits. Phys. Rev. Lett., 96: 246803

Wei L F, Liu Y X, Markus J, et al. 2006. Macroscopic Einstein-Podolsky-Rosen pairs in superconducting circuits. Phys. Rev., A73: 052307

Weihs G, et al. 1998. Violation of Bell's inequality under strict einstein locality conditions. Phys. Rev. Lett., 81: 5039

《现代物理基础丛书》已出版书目

（按出版时间排序）

1. 现代声学理论基础	马大猷 著	2004.03
2. 物理学家用微分几何 (第二版)	侯伯元，侯伯宇 著	2004.08
3. 数学物理方程及其近似方法	程建春 编著	2004.08
4. 计算物理学	马文淦 编著	2005.05
5. 相互作用的规范理论 (第二版)	戴元本 著	2005.07
6. 理论力学	张建树，等 编著	2005.08
7. 微分几何入门与广义相对论 (上册 · 第二版)	梁灿彬，周彬 著	2006.01
8. 物理学中的群论 (第二版)	马中骐 著	2006.02
9. 辐射和光场的量子统计	曹昌祺 著	2006.03
10. 实验物理中的概率和统计 (第二版)	朱永生 著	2006.04
11. 声学理论与工程应用	朱海潮，等 编著	2006.05
12. 高等原子分子物理学 (第二版)	徐克尊 著	2006.08
13. 大气声学 (第二版)	杨训仁，陈宇 著	2007.06
14. 输运理论 (第二版)	黄祖洽 著	2008.01
15. 量子统计力学 (第二版)	张先蔚 编著	2008.02
16. 凝聚态物理的格林函数理论	王怀玉 著	2008.05
17. 激光光散射谱学	张明生 著	2008.05
18. 量子非阿贝尔规范场论	曹昌祺 著	2008.07
19. 狭义相对论 (第二版)	刘 辽，等 编著	2008.07
20. 经典黑洞与量子黑洞	王永久 著	2008.08
21. 路径积分与量子物理导引	侯伯元，等 著	2008.09
22. 量子光学导论	谭维翰 著	2009.01
23. 全息干涉计量——原理和方法	熊秉衡，李俊昌 编著	2009.01
24. 实验数据多元统计分析	朱永生 编著	2009.02
25. 微分几何入门与广义相对论(中册 · 第二版)	梁灿彬，周彬 著	2009.03
26. 中子引发轻核反应的统计理论	张竞上 著	2009.03
27. 工程电磁理论	张善杰 著	2009.08
28. 微分几何入门与广义相对论(下册 · 第二版)	梁灿彬，周彬 著	2009.08
29. 经典电动力学	曹昌祺 著	2009.08
30. 经典宇宙和量子宇宙	王永久 著	2010.04

31. 高等结构动力学(第二版)	李东旭 编著	2010.09
32. 粉末衍射法测定晶体结构(第二版 · 上、下册)	梁敬魁 编著	2011.03
33. 量子计算与量子信息原理 ——第一卷：基本概念	Giuliano Benenti 等著 王文阁, 李保文 译	2011.03
34. 近代晶体学(第二版)	张克从 著	2011.05
35. 引力理论(上、下册)	王永久 著	2011.06
36. 低温等离子体 ——等离子体的产生、工艺、问题及前景	B. M. 弗尔曼, И. M.扎什京 编著 邱励俭 译	2011.06
37. 量子物理新进展	梁九卿，韦联福 著	2011.08